

Elektrony i dziury.

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl

<http://www.fuw.edu.pl/~szczytko/NT>

Ninżynieria
nanostruktur



Podstawy modelu jednoelektronowego

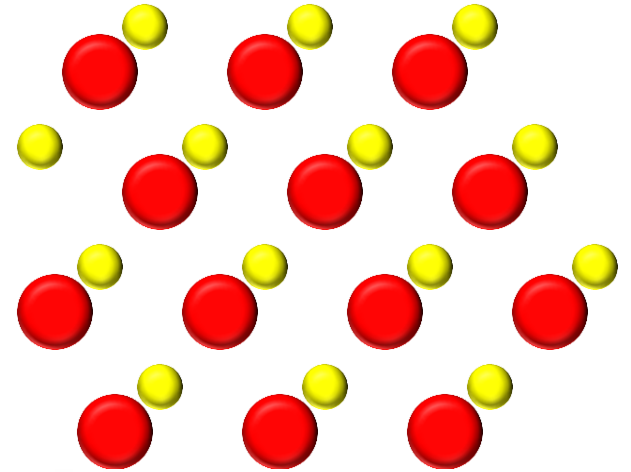
Twierdzenie Blocha

Jeśli potencjał jest periodyczny $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$
to rozwiązania równania Schrodingera

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

mają postać: $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$

Wektory sieci Bravais

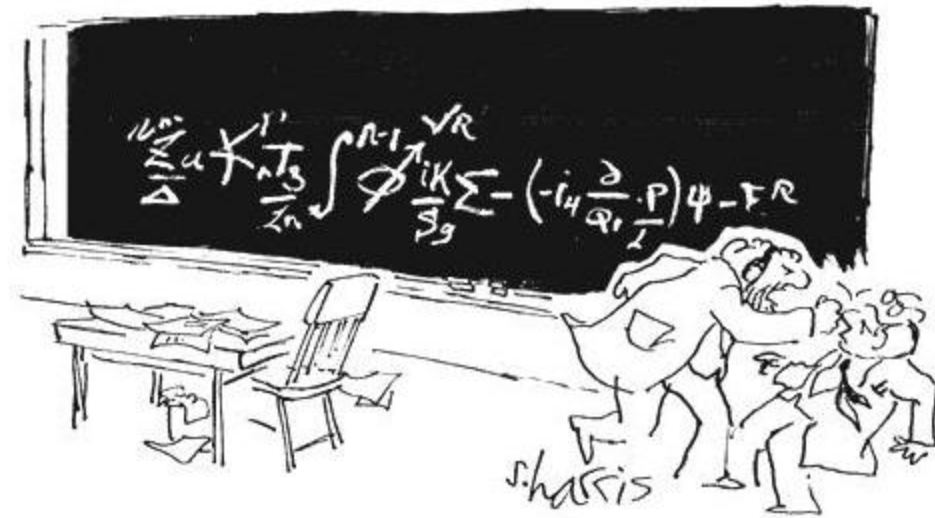


gdzie tzw. f. Blocha: $u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$

$$\psi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

$$\hat{p}\psi(\vec{r}) = -i\hbar(i\vec{k} + \nabla u_{n,\vec{k}})e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\psi(\vec{r})$$



"You want proof? I'll give you proof!"

Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Przykład:

Ruch elektronu w potencjale periodycznym.

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\psi_{n,\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$$

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha

Liczmy energię dla wektorów \vec{k} przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$
$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'$; $\vec{k}' \in$ 1strefa Brillouin'a

$$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot 0 \quad G_0 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$$

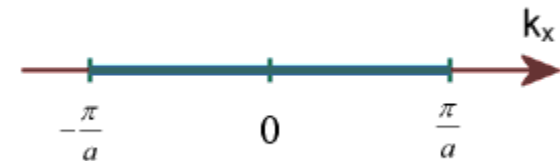
$$G_1 = \frac{2\pi}{a} \cdot 1 \quad G_1 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} (k' \pm 1)^2$$

$$G_2 = \frac{2\pi}{a} \cdot 2 \quad G_2 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} (k' \pm 2)^2$$

.....

.....

W pustej przestrzeni?



1 wymiar: $[hkl] =$

000,

100, $\bar{1}00$, 200, $\bar{2}00$,

Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

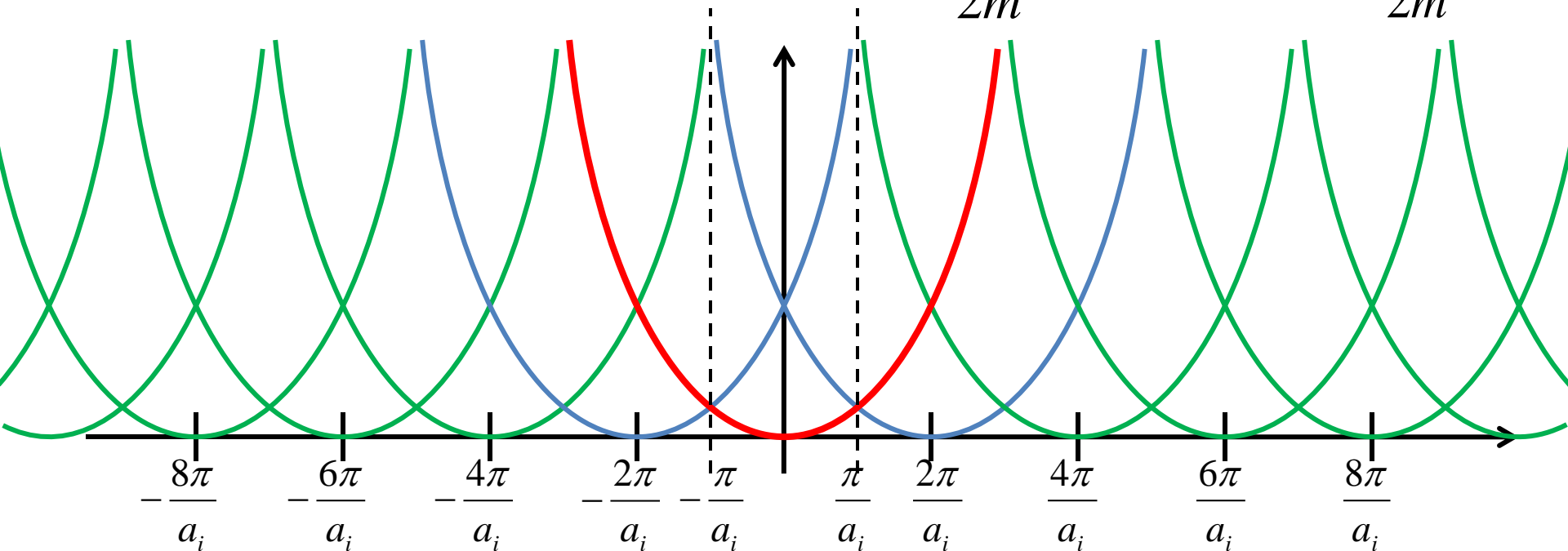
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

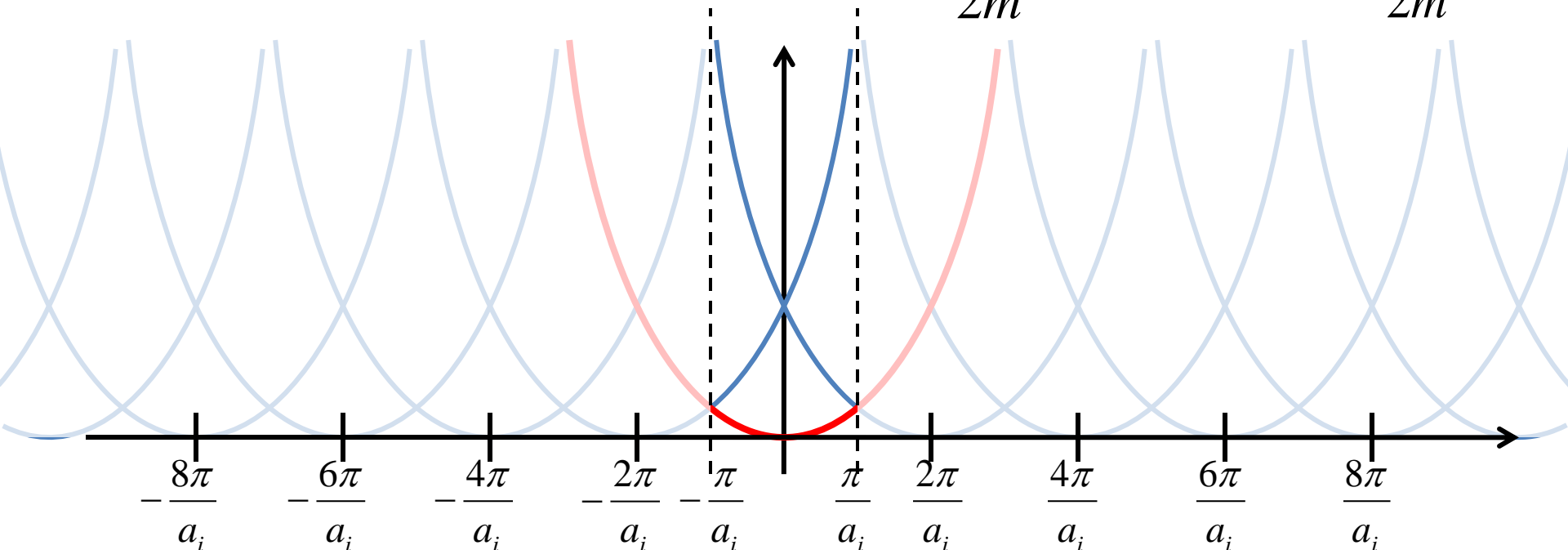
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

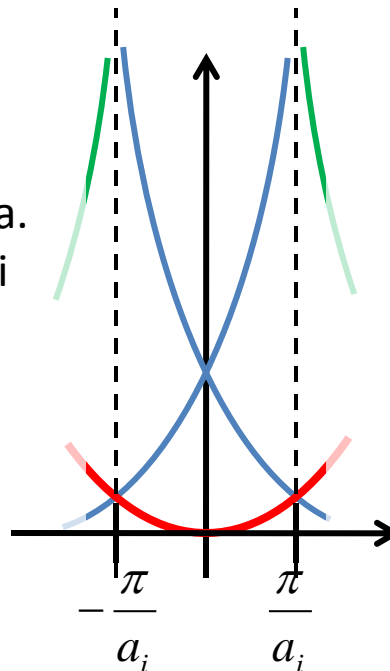
$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Model prawie swobodnych elektronów – dla fali płaskiej w pustej przestrzeni energia od wektora falowego wyraża się wzorem:

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

Jest tzw. zredukowana strefa Brillouina.
Na granicy strefy $\pm G/2 = \pm \pi/a$ wartości energii są zdegenerowane.

W pustej przestrzeni?



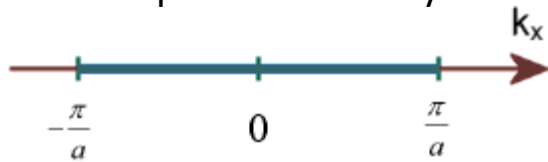
Podstawy modelu jednoelektronowego

Strefa Brillouina

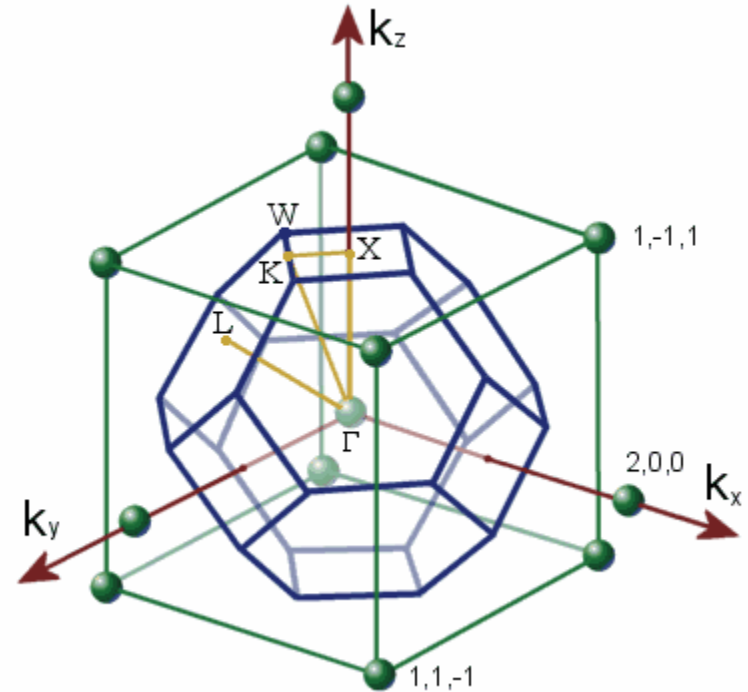
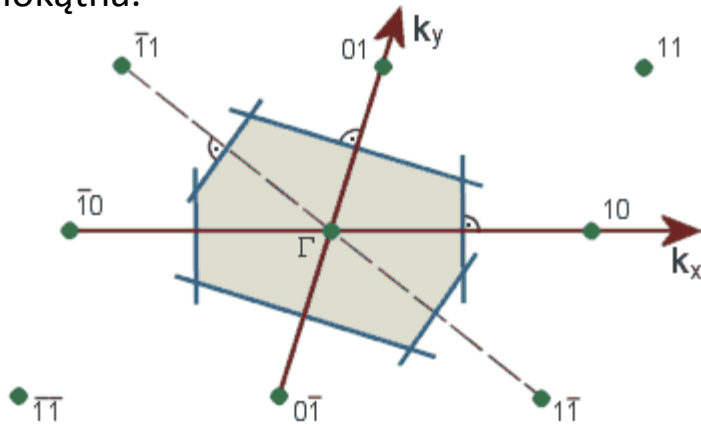
Wartości własne energii są periodyczną funkcją liczby kwantowej k . $\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G})$$

Strefa Brillouina w przestrzeni 1-wymiarowej



Strefa Brillouina w przestrzeni 2-wymiarowej, sieć ukośnokątna.



Strefa Brillouina dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej (fcc). Ograniczające strefę ściany kwadratowe i sześciokątne pochodzą, odpowiednio, od punktów sieci odwrotnej typu $(2,0,0)$ i $(1,1,1)$.

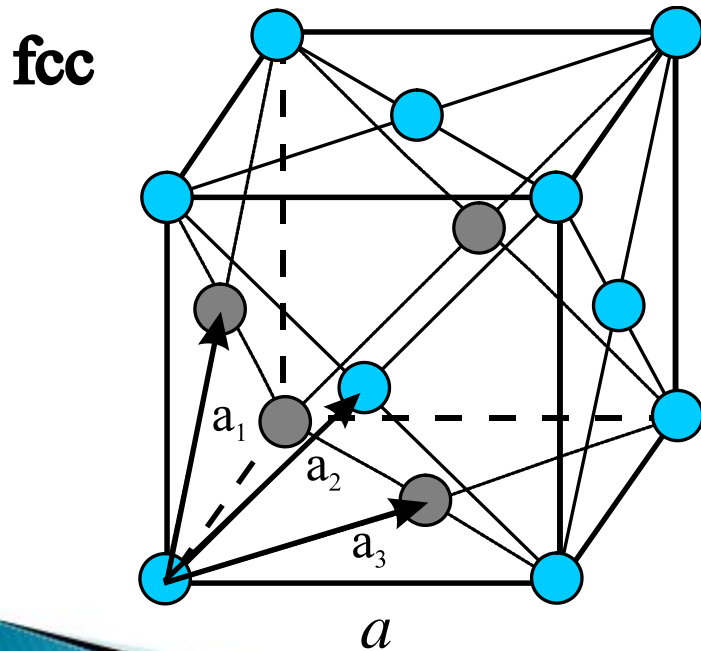
Pusta sieć - fcc

Sieć odwrotna do fcc to bcc

Na ćwiczeniach rozwiązaliśmy problem sieci odwrotnej do sieci fcc.

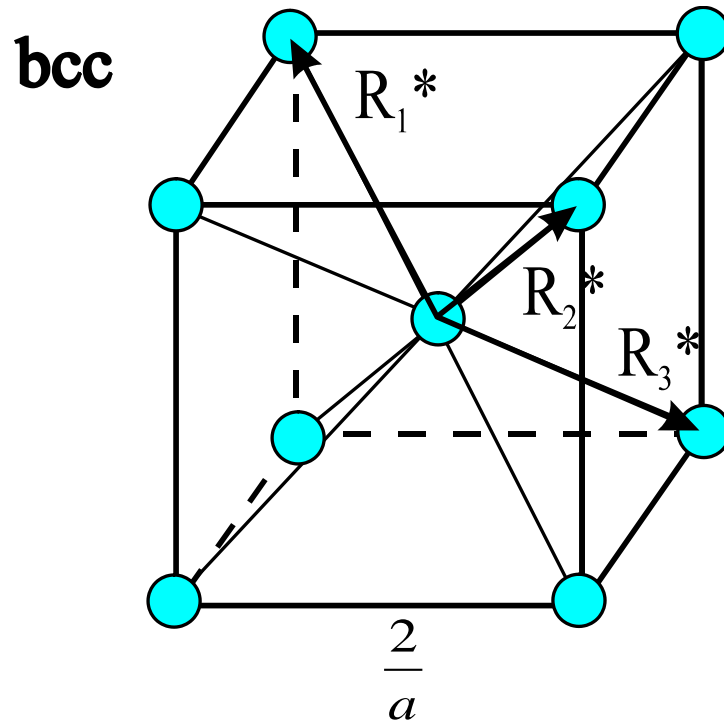
Sieć prosta

$$\mathbf{a}_1 = \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right); \mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right); \mathbf{a}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right);$$



Sieć odwrotna

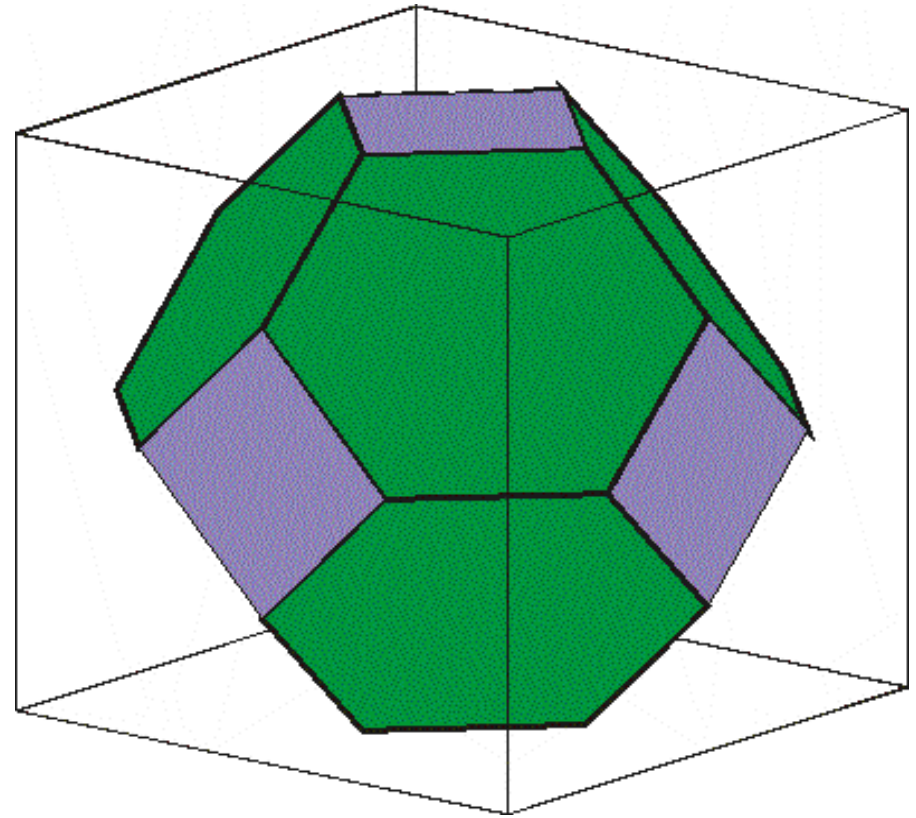
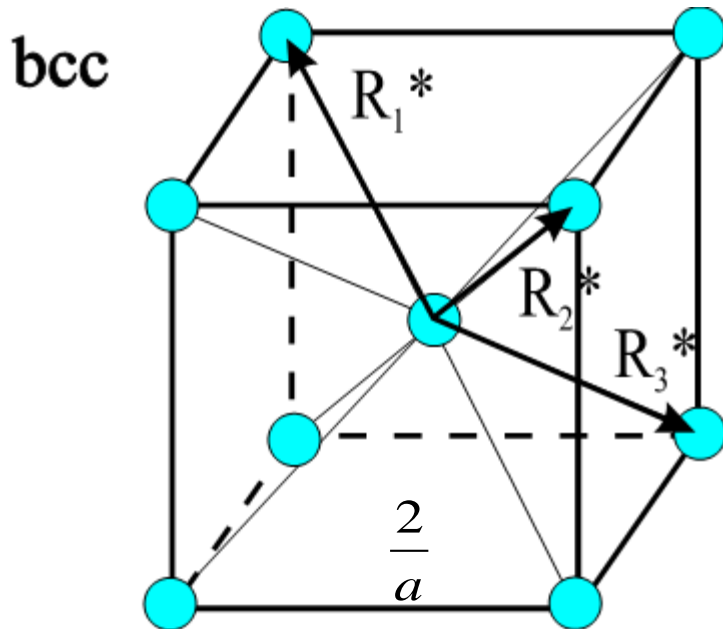
$$\mathbf{R}_1^* = \frac{1}{a}(-1, 1, 1); \mathbf{R}_2^* = \frac{1}{a}(1, -1, 1); \mathbf{R}_3^* = \frac{1}{a}(1, 1, -1);$$



Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc

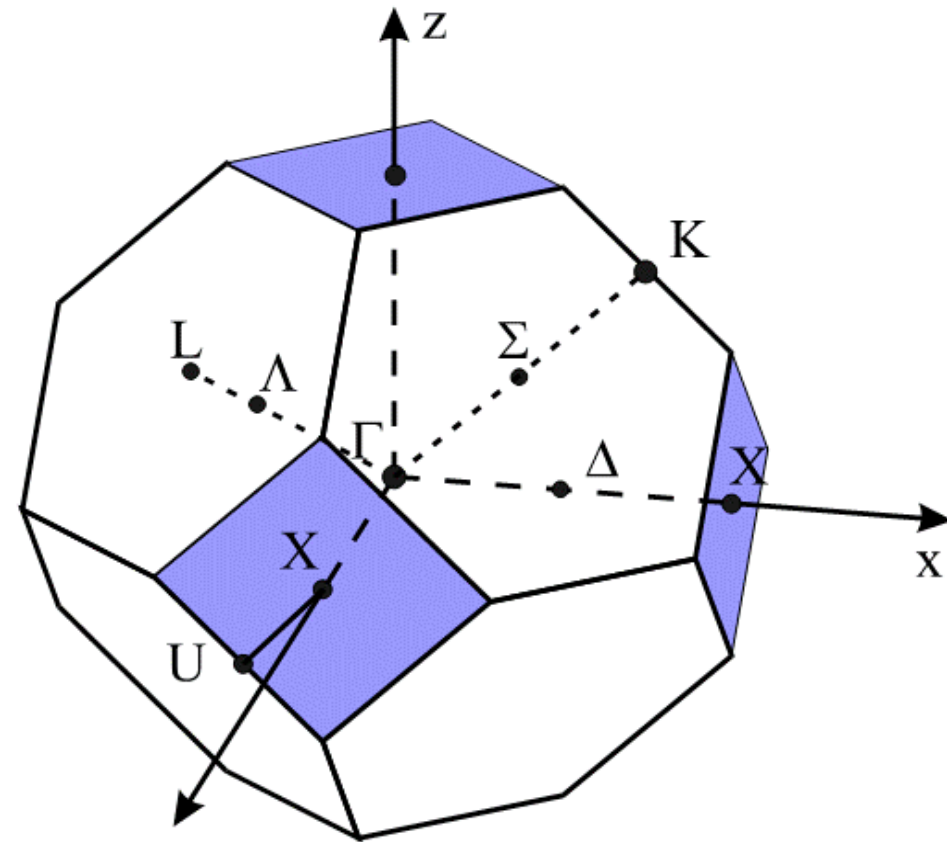
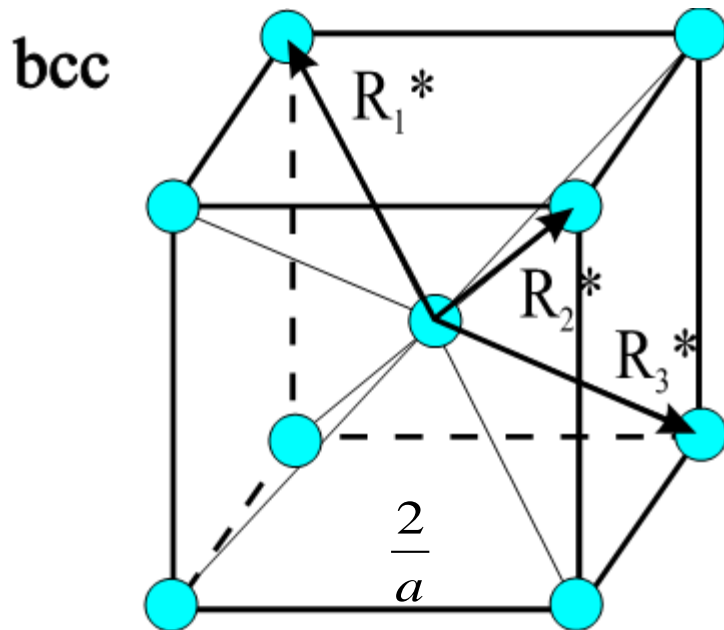
Komórka Vignera-Seitza



Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc

Komórka Vignera-Seitza



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

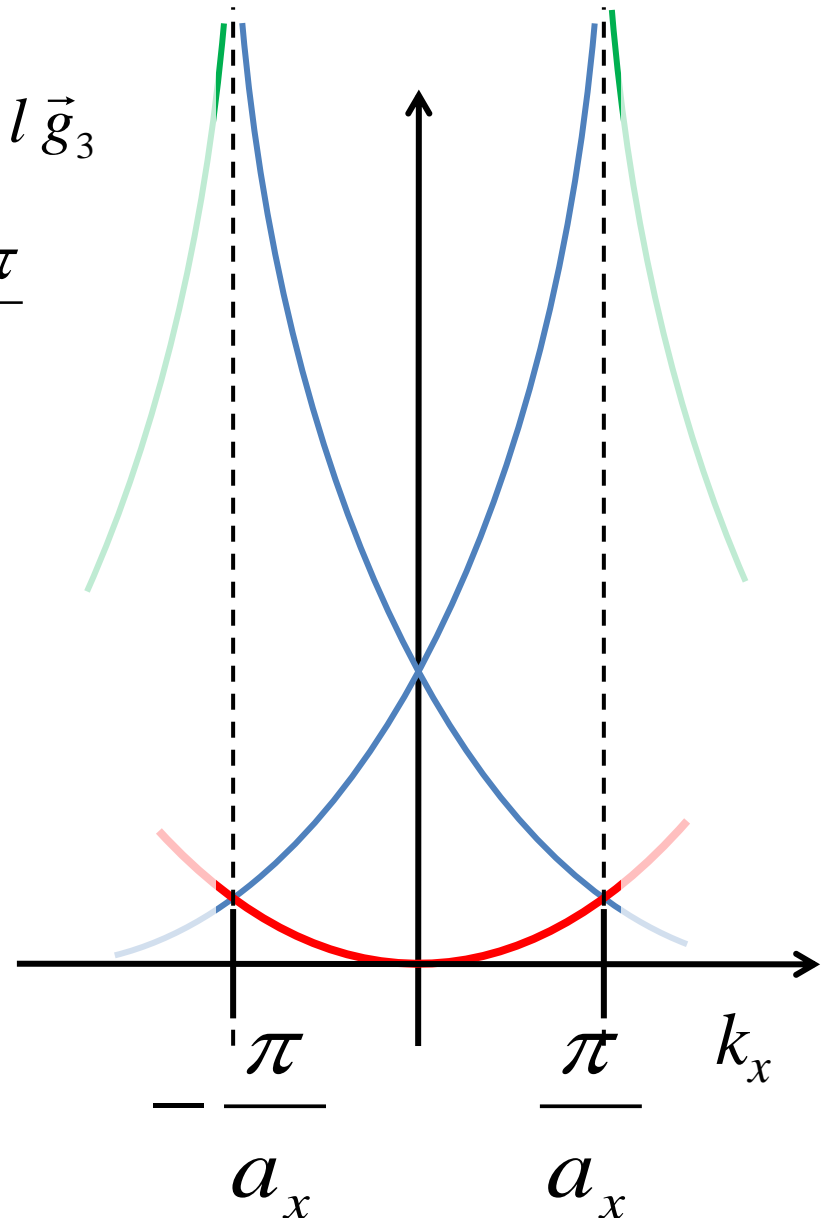
$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \quad \vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} =$$
$$= E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa dla gazu elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl]=$

$$000,$$
$$100, \bar{1}00, 200, \bar{2}00,$$



Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha

Liczmy energię dla wektorów \vec{k} przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'$; $\vec{k}' \in \text{Istrefa Brillouin'a}$

$$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot [0, 0, 0]$$

$$G_0 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$$

$$G_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 1, \pm 1, \pm 1]$$

$$G_3 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x \pm 1)^2 + (\pm 1)^2 + (\pm 1)^2 \right]$$

$$G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x \pm 1)^2 + 2 \right]$$

$$G_8 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, \pm 2, 0]$$

$$G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0]; [0, \pm 2, 0], [0, 0, \pm 2]$$

.....

$$G_4 : E(k') = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x)^2 + 4 \right] \\ \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x \pm 2)^2 \right] \end{cases}$$

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha

Liczmy energię dla wektorów \vec{k} przesuniętych do pierwszej strefy Brillouine'a

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$\vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

$\vec{k} = \vec{G} + \vec{k}'$; $\vec{k}' \in$ 1strefa Brillouin'a

$$G_0 = \frac{2\pi}{a} \cdot [0, 0, 0]$$

$$G_0 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2$$

$$G_3 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 1, \pm 1, \pm 1]$$

$$G_3 : E(k') = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x \pm 1)^2 + (\pm 1)^2 + (\pm 1)^2 \right]$$

$$G_4 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, 0, 0]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left[(k_x \pm 1)^2 + 2 \right]$$

$$G_8 = \frac{2\pi}{a} \cdot [\pm 2, \pm 2, 0]$$

3 wymiary: $[hkl]=$

000,

100, $\bar{1}00$, 200, $\bar{2}00$,

010, $0\bar{1}0$, 001, $00\bar{1}$,

110, 101, $1\bar{1}0$, $10\bar{1}$, $\bar{1}01$, $\bar{1}\bar{1}0$, $\bar{1}0\bar{1}$, $\bar{1}\bar{1}0$

Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha

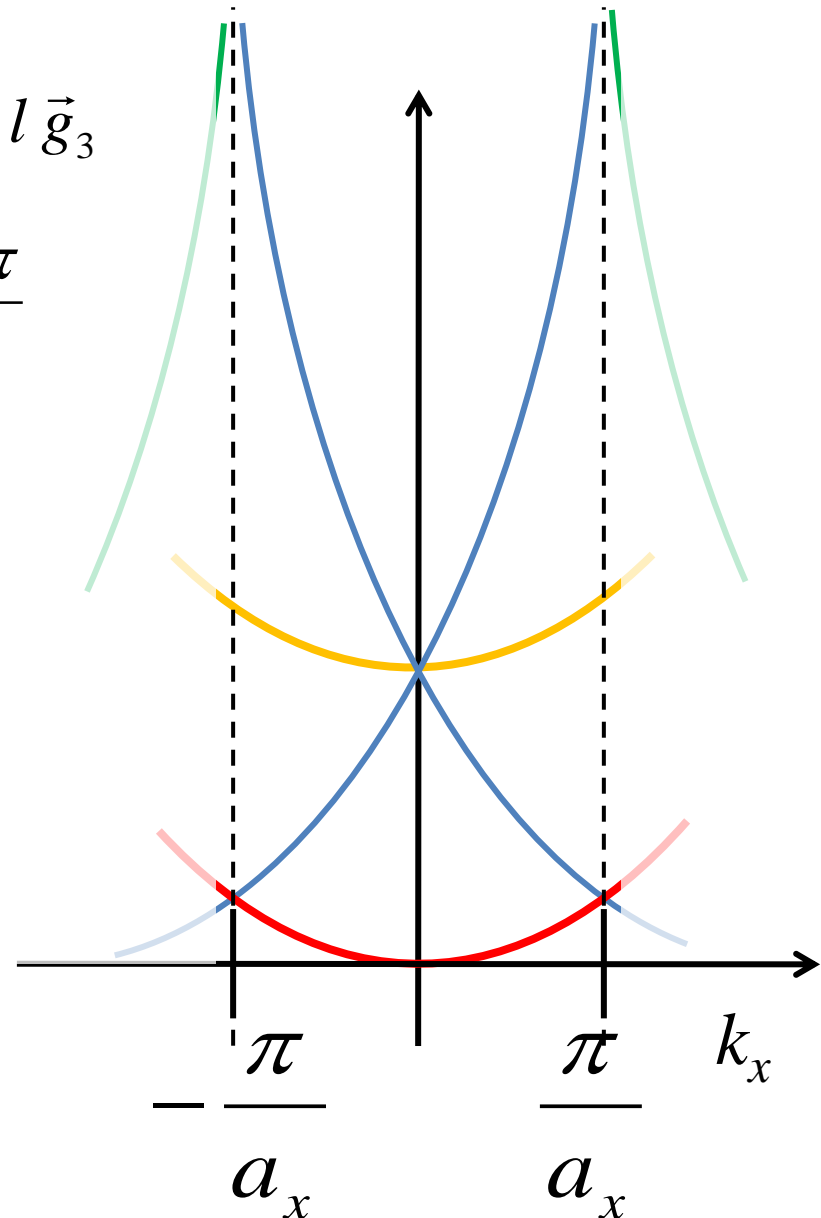
$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \quad \vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa dla gazów elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl]=$

$$\begin{aligned} &000, \\ &100, \bar{1}00, 200, \bar{2}00, \\ &010, 0\bar{1}0, 001, 00\bar{1}, \end{aligned}$$



Model pustej sieci

Twierdzenie Blocha

$$E(n, \vec{k}) = E(n, \vec{k} + \vec{G}) \quad \vec{G} = h\vec{g}_1 + k\vec{g}_2 + l\vec{g}_3$$

$$E(n=1, \vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E(\vec{k} + \vec{G}) = \frac{\hbar^2 (\vec{k} + \vec{G})^2}{2m}$$

$$g_i = \frac{2\pi}{a_i}$$

Struktura pasmowa dla gazów elektronów swobodnych w sieci regularnej prostej (stała sieci a), wierzchołki parabol mają wskaźniki $[hkl]=$

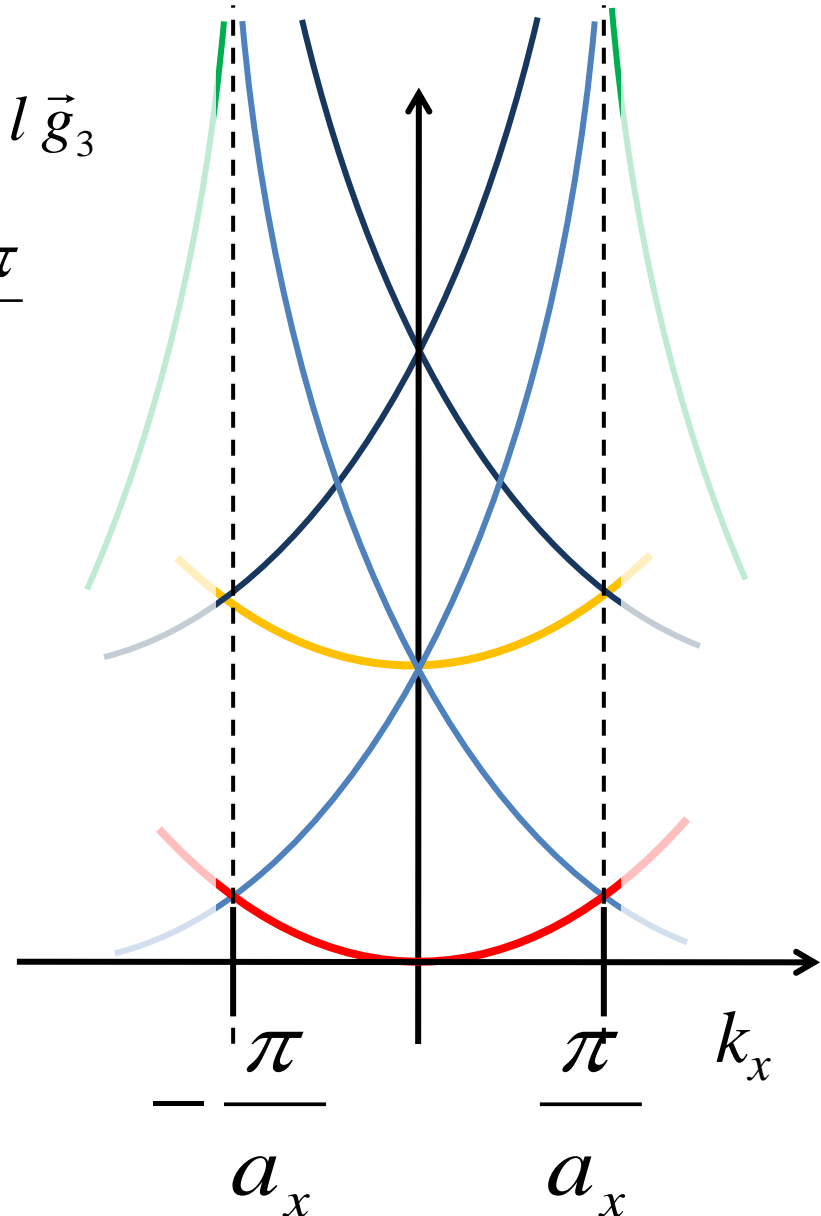
000,

100, $\bar{1}00$, 200, $\bar{2}00$,

010, $0\bar{1}0$, 001, $00\bar{1}$,

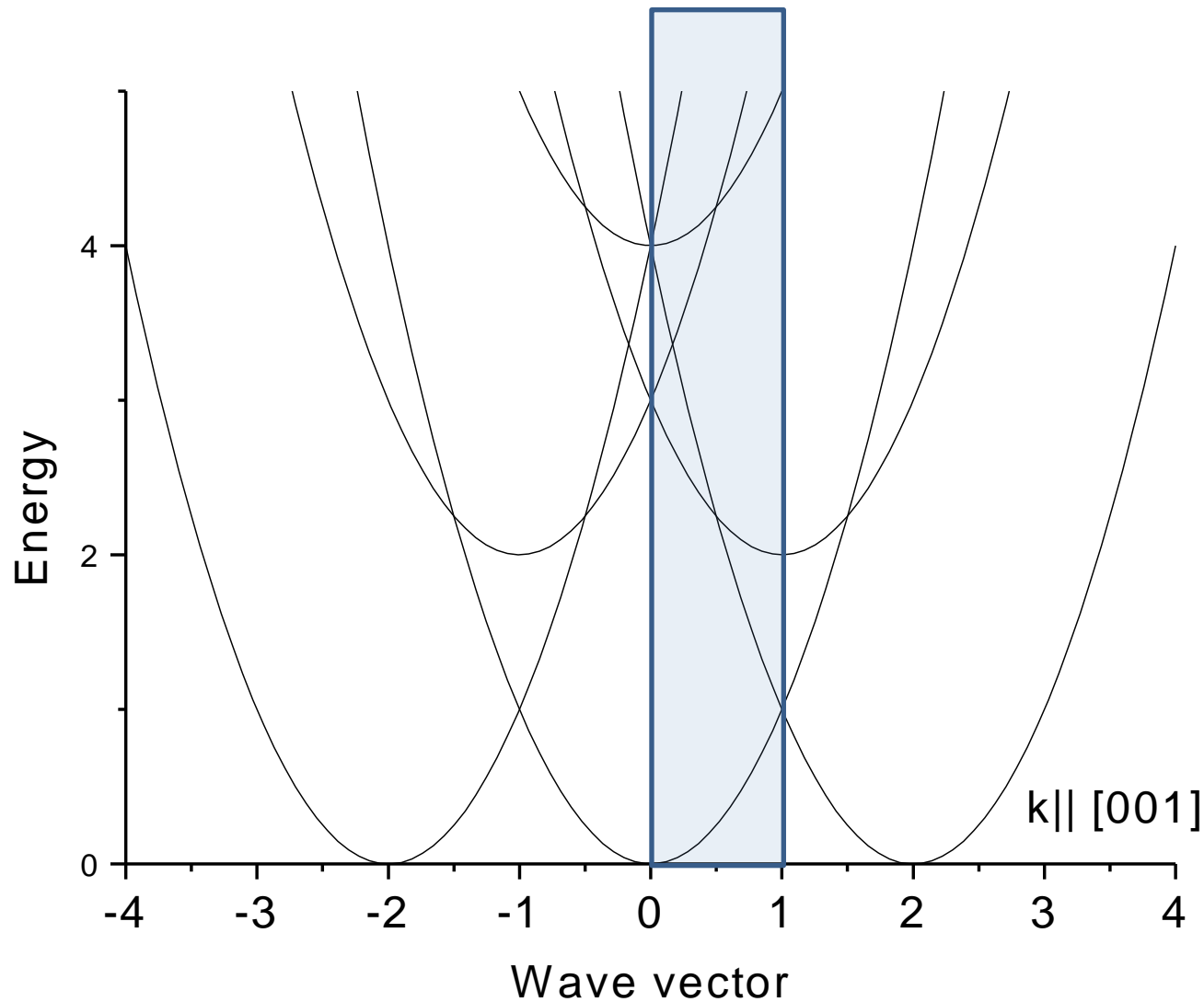
110, 101, $1\bar{1}0$, $10\bar{1}$, $\bar{1}01$, $\bar{1}\bar{1}0$, $\bar{1}0\bar{1}$, $\bar{1}\bar{1}0$

W pustej przestrzeni?



Model pustej sieci

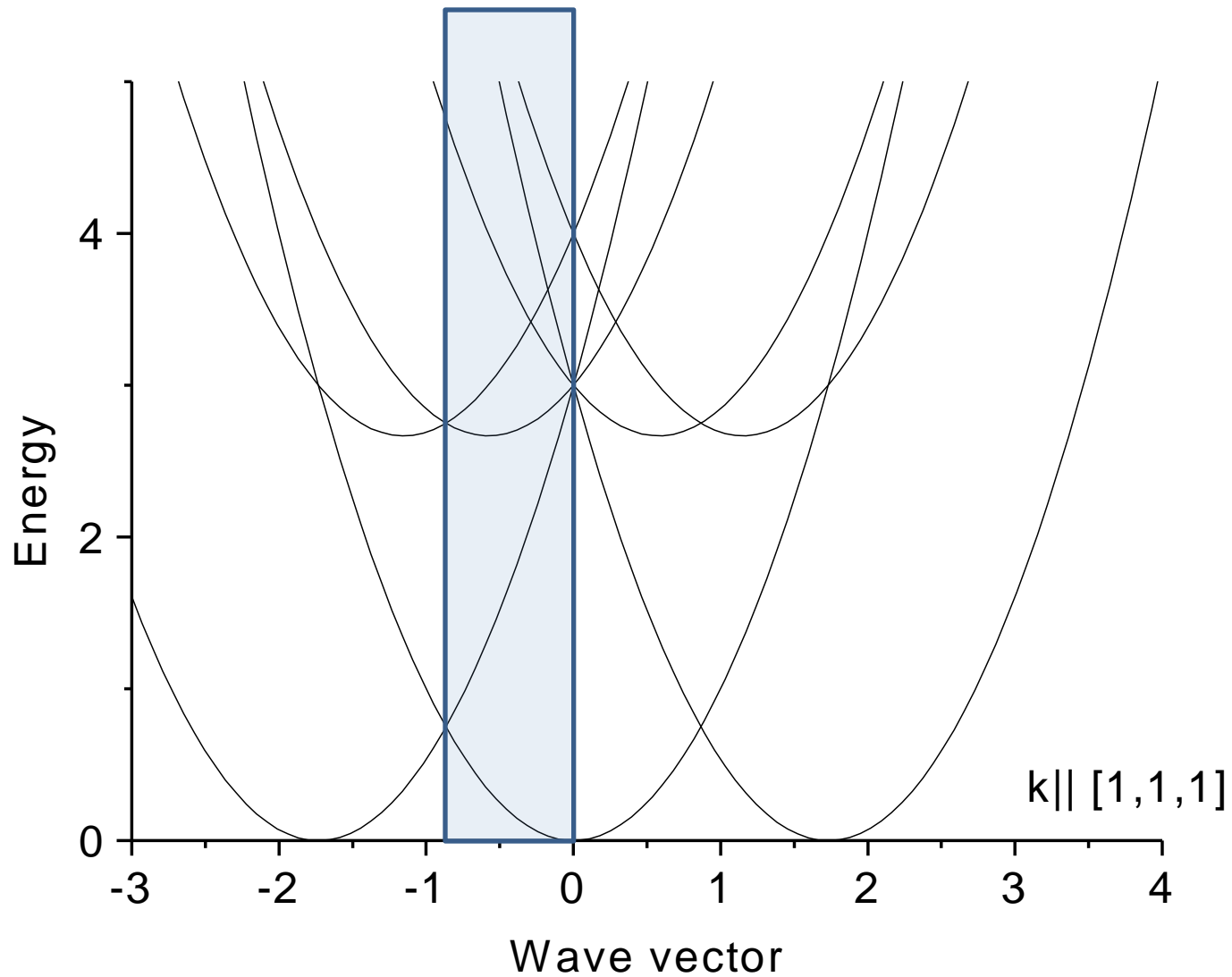
Kierunek $[001]$ X



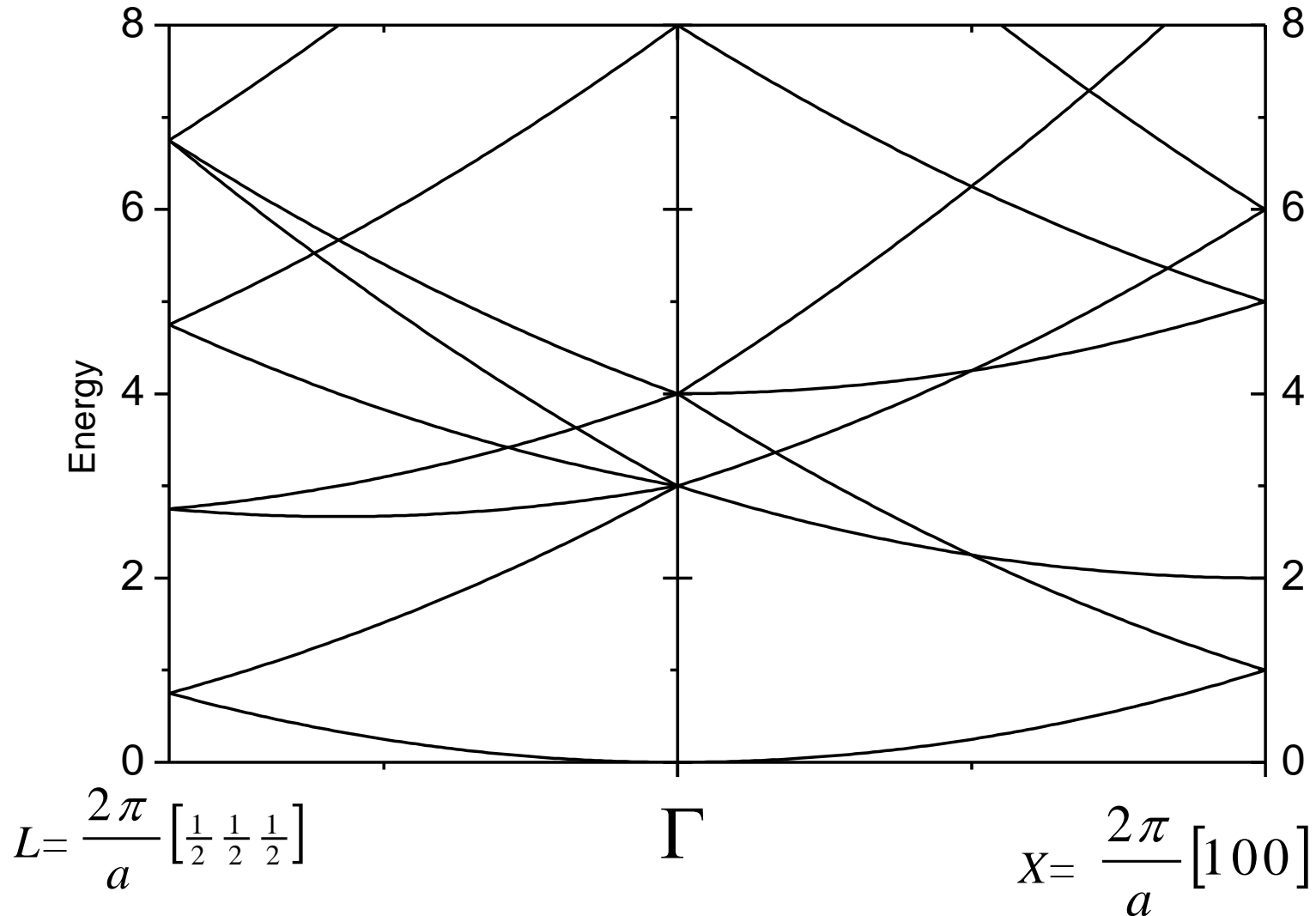
X

Model pustej sieci

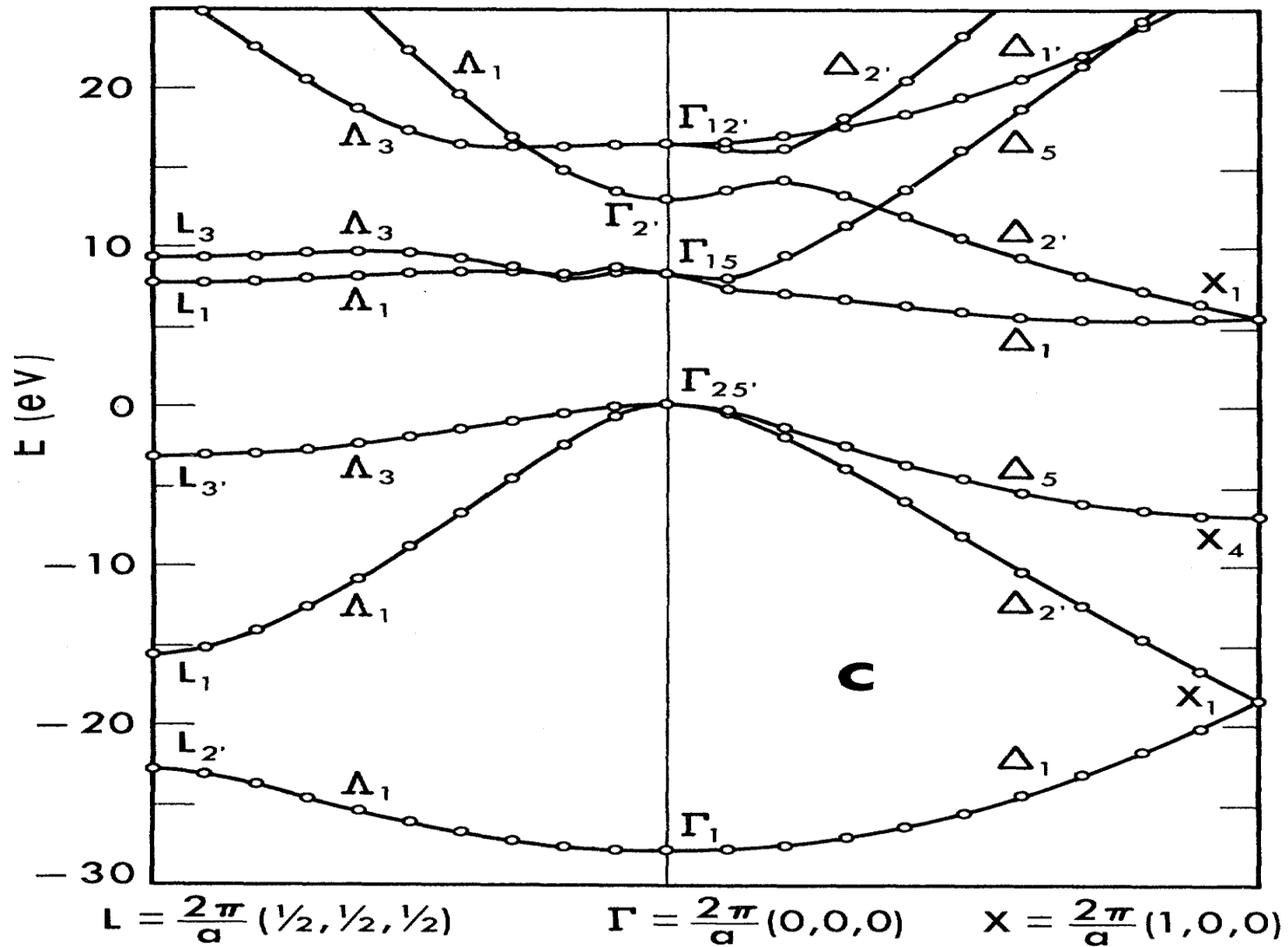
Kierunek $[111]$ L



Model pustej sieci

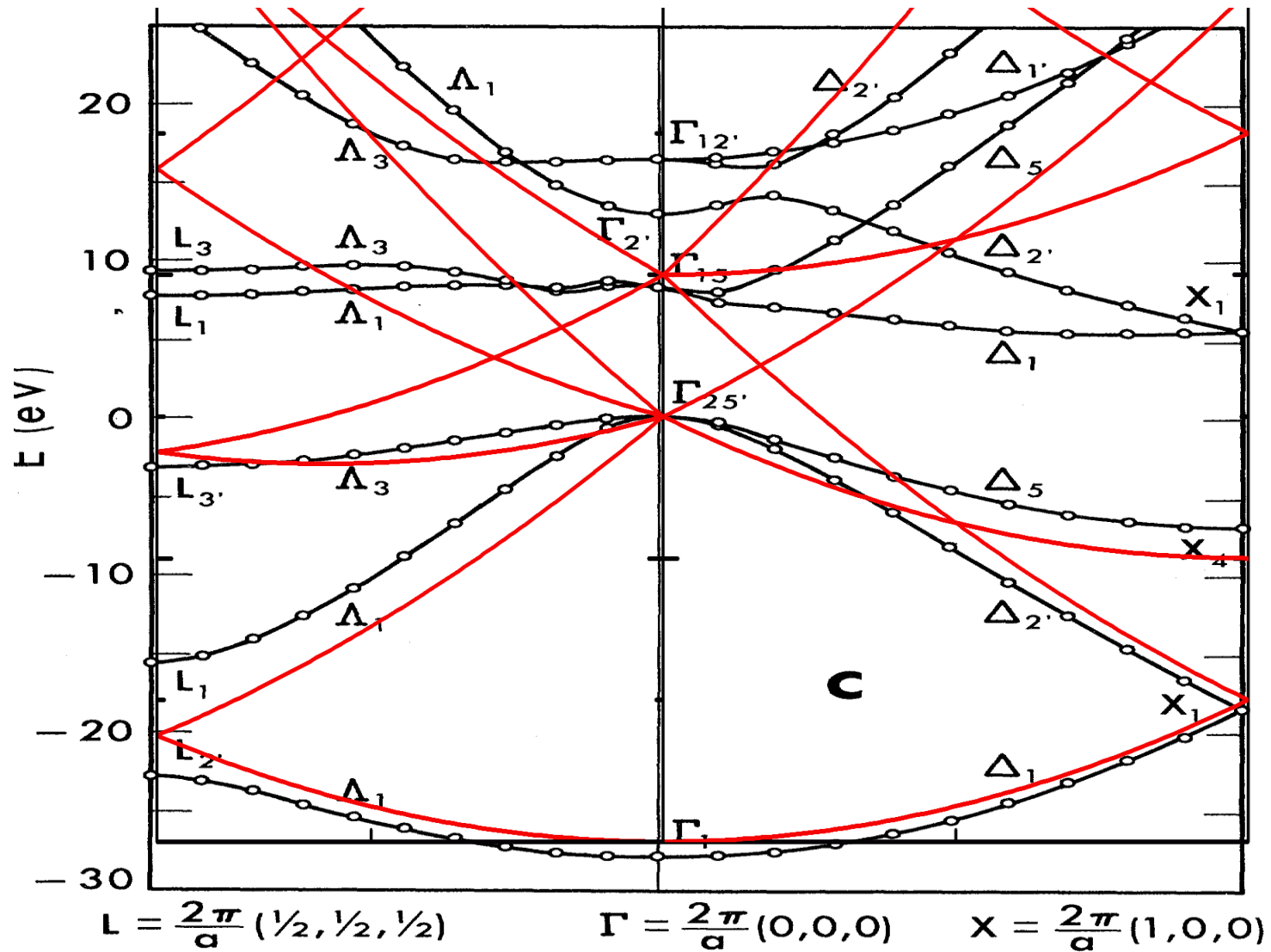


Model pustej sieci



Diamond, Saslow et al. PRL1966

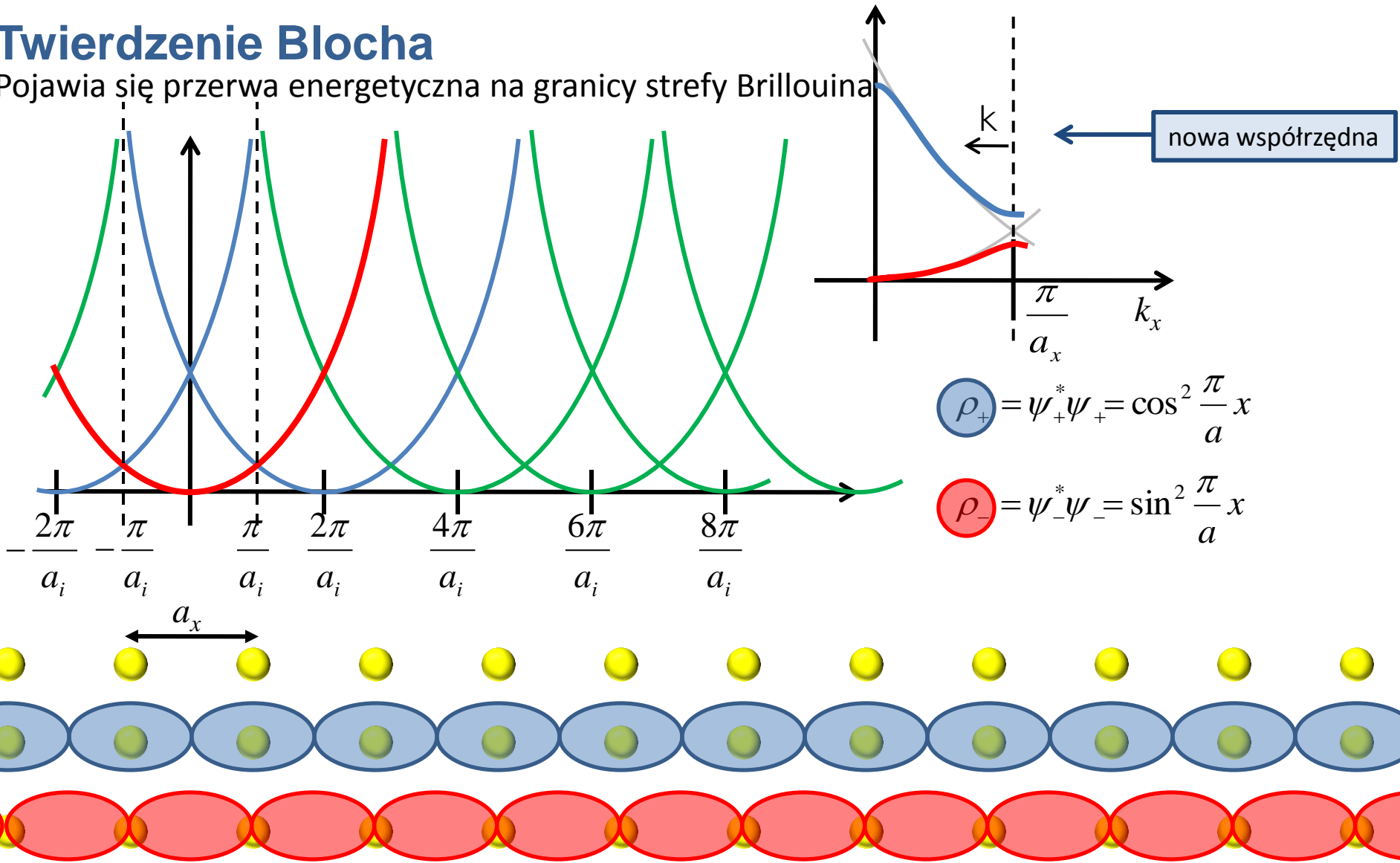
Model pustej sieci



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



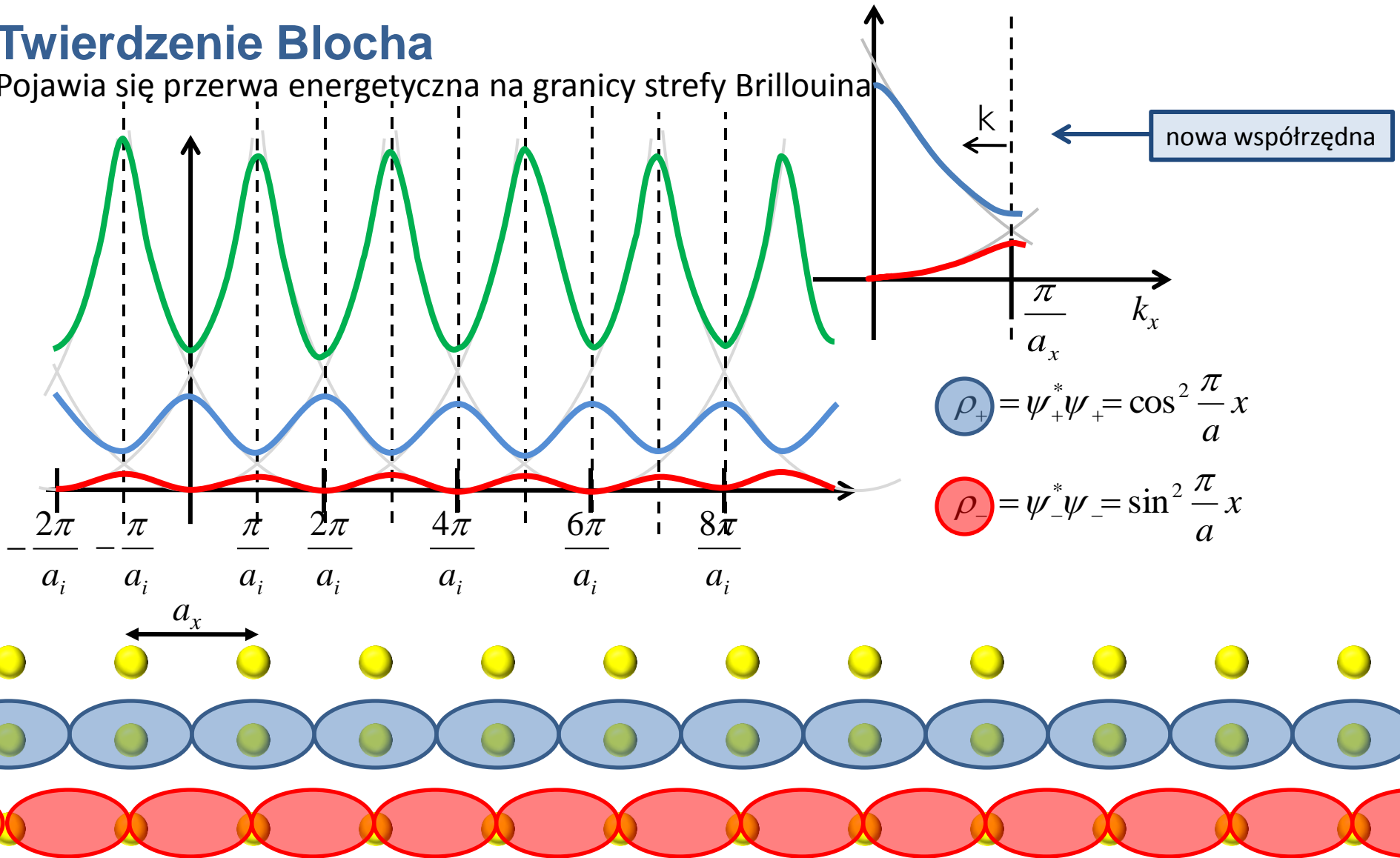
$$\rho_+ = \psi_+^* \psi_+ = \cos^2 \frac{\pi}{a} x$$

$$\rho_- = \psi_-^* \psi_- = \sin^2 \frac{\pi}{a} x$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

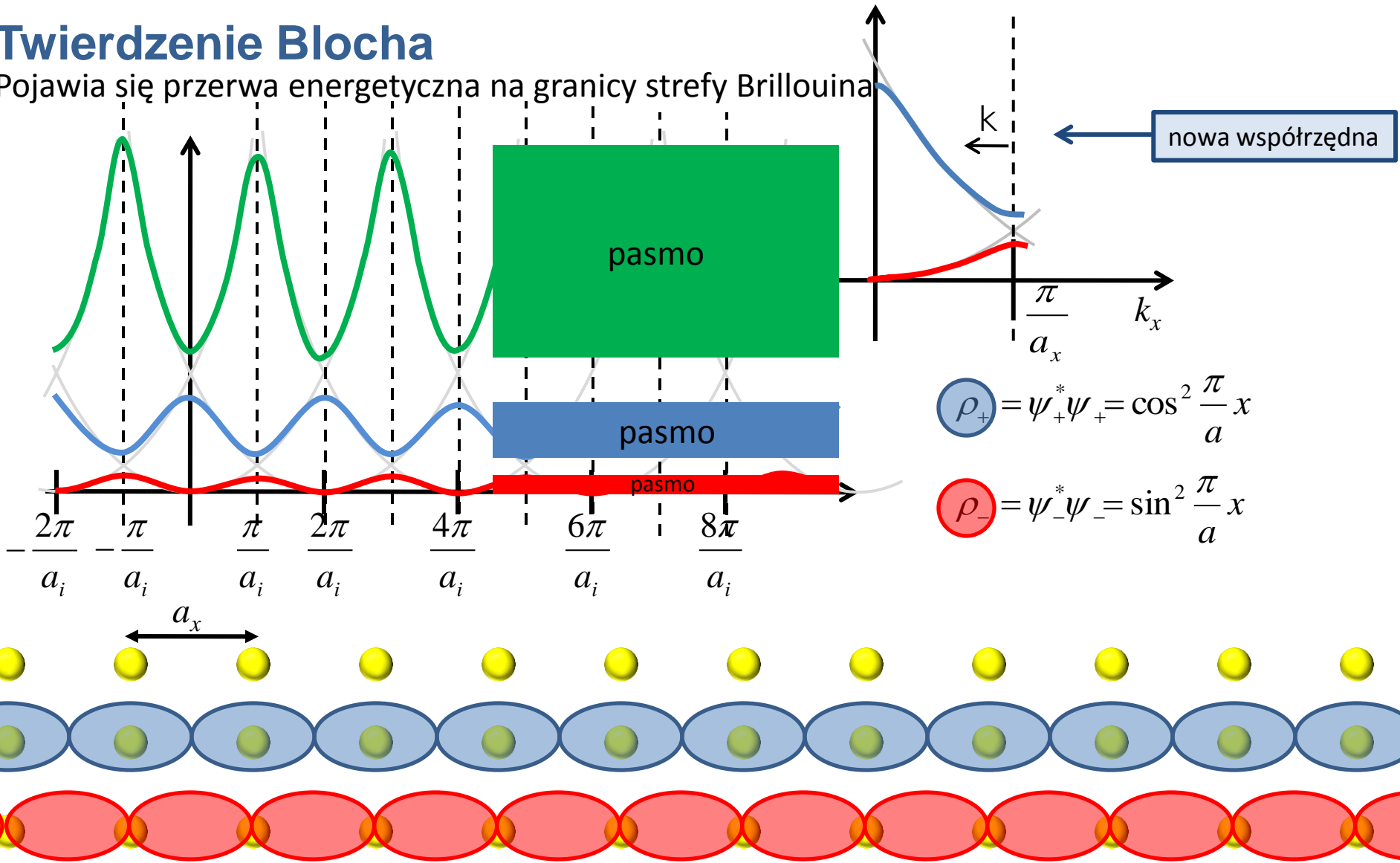
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

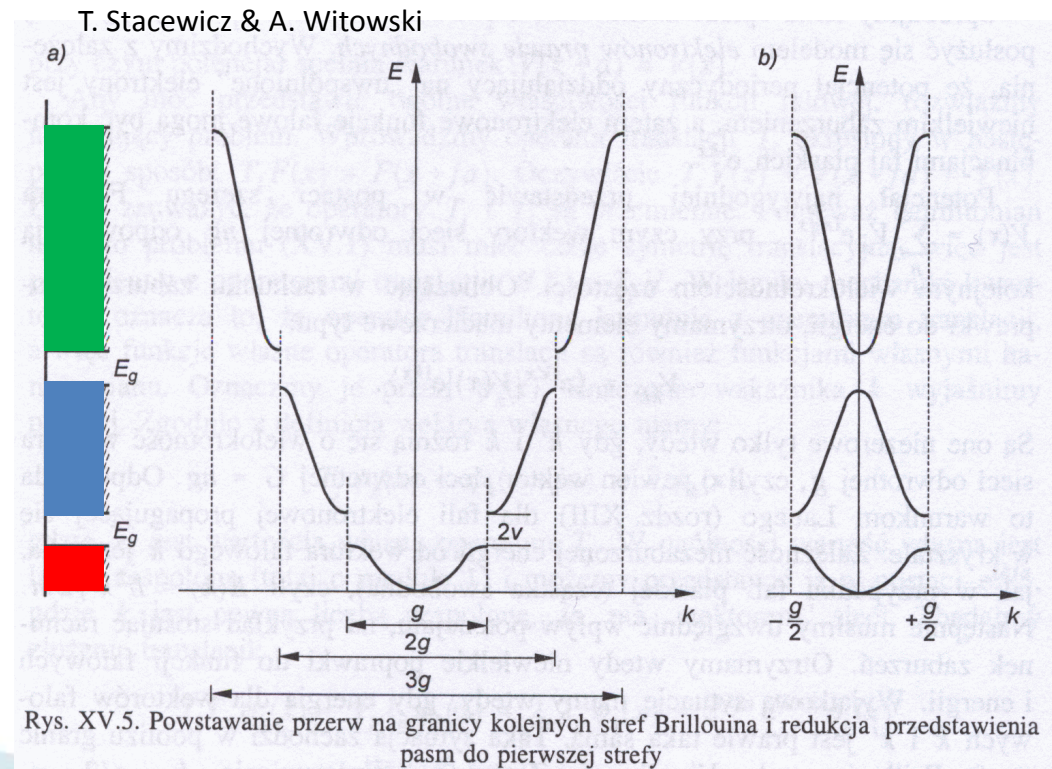
Pojawia się przerwa energetyczna na granicy strefy Brillouina



Podstawy modelu jednoelektronowego

Twierdzenie Blocha

- Ponieważ funkcja Blocha przesunięta o wektor sieci odwrotnej nie zmienia się to wygodnie jest przedstawiać wyniki tylko w I -szej strefie Brillouina. Trzeba wówczas numerować pasma energetyczne.
- Stan elektronu w ciele stałym zadany jest przez wektor falowy z I -szej strefy, numer pasma oraz rzut spinu.



Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

Przybliżenie kp

Wektor k nie jest pędem (mówimy, że jest quasi-pędem).

$$\hat{p}\psi(\vec{r}) = -i\hbar(i\vec{k} + \nabla)u_{n,\vec{k}}e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar\vec{k}\psi(\vec{r})$$

Funkcja Blocha w równaniu Schrodingera:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = E\Psi(\mathbf{r}, t)$$

$$\begin{aligned} \Delta u_{n,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Delta u_{n,\mathbf{k}} + i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla u_{n,\mathbf{k}} + i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \nabla u_{n,\mathbf{k}} - k^2 u_{n,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ &= \left(\Delta u_{n,\mathbf{k}} + 2i\mathbf{k}\nabla u_{n,\mathbf{k}} - k^2 u_{n,\mathbf{k}} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{aligned}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_{n,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar}{m}\mathbf{k}\hat{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) u_{n,\mathbf{k}}$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

Po uproszczeniu $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \hat{\mathbf{p}} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(E - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół $\mathbf{k}=0$:

$$E'_n(\mathbf{k}) = E'_n(0) + H'_{nn} + \sum_{l \neq n} \frac{|H'_{nl}|^2}{E_n(0) - E_l(0)} + \dots$$

gdzie
$$H'_{nl} = \int u_{n,0}^*(r) \mathbf{H}' u_{l,0}(r) d_3r = -\frac{i\hbar^2}{m} \mathbf{k} \int u_{n,0}^*(r) \nabla u_{l,0}(r) d_3r$$

Jeśli rozwijamy wokół ekstremum $a_i=0$

liniowe w k

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \sum_{i=1}^3 a_i k_i + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\hbar^2}{2m} \delta_{ij} + b_{ij} \right) k_i k_j + \dots$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół ekstremum:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \sum_{ij} m^{-1}_{ij} \frac{\hbar^2 k_i k_j}{2}$$

Przez analogię do klasycznej zależności energii kinetycznej od pędu wprowadzamy tensor odwrotności masy efektywnej m^{-1}_{ij} :

$$m^{-1}_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\hbar^2 \int u_{n0}^* \frac{\partial u_{l0}}{\partial x_i} d_3 r \int u_{l0} \frac{\partial u_{n0}}{\partial x_j} d_3 r}{E_n - E_l} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j} \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$$

Jeśli ekstremum energii jest w punkcie $\Gamma(\mathbf{k}=0)$ to powierzchnia stałej energii jest elipsoidą w przestrzeni \mathbf{k} , która po sprowadzeniu do osi głównych ma postać:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2}{m_1^*} + \frac{k_2^2}{m_2^*} + \frac{k_3^2}{m_3^*} \right)$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół ekstremum dla kryształu jednoosiowego (np. GaN):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_{\perp}^*} + \frac{k_3^2}{m_{\parallel}^*} \right)$$

Dla kryształu kubicznego:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \text{tzw. pasmo sferyczne}$$

W pobliżu ekstremum (np. punkt G($\mathbf{k}=0$)) możemy ograniczyć się do przybliżenia parabolicznego – **pasmo paraboliczne**.

W ogólności w zależności energii od wektora falowego występują człony wyższego rzędu, które zostały zaniedbane (wyższe rzędy rachunku zaburzeń).

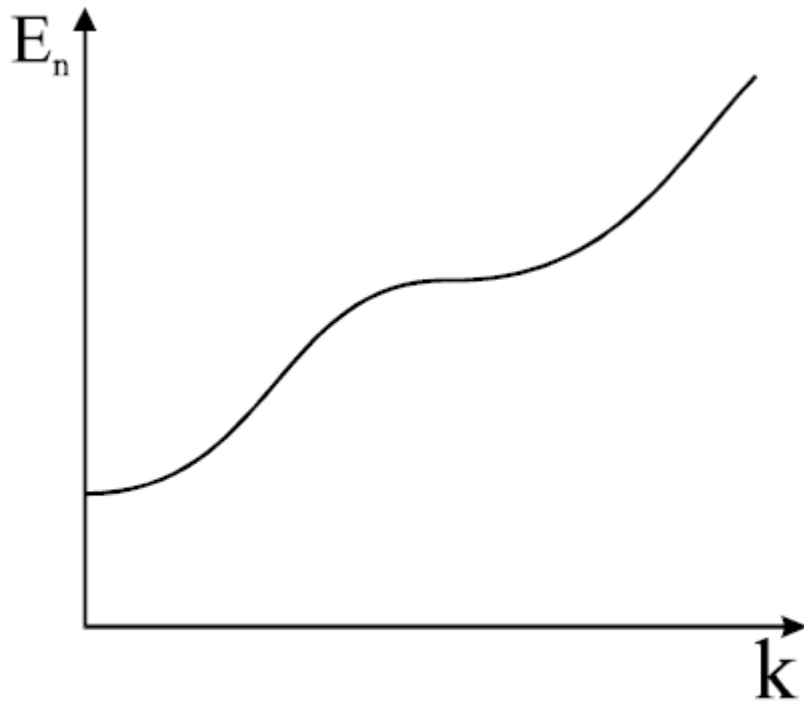
W ogólności energia elektronu jest funkcją składowych wektora falowego $\mathbf{k}=(k_1, k_2, k_3)$.

Powierzchnia stałej energii w ogólnym przypadku może mieć skomplikowany charakter, a jej kształt zależy od wszystkich pasm. Badanie tensora masy efektywnej to jeden z głównych problemów fizyki ciała stałego.

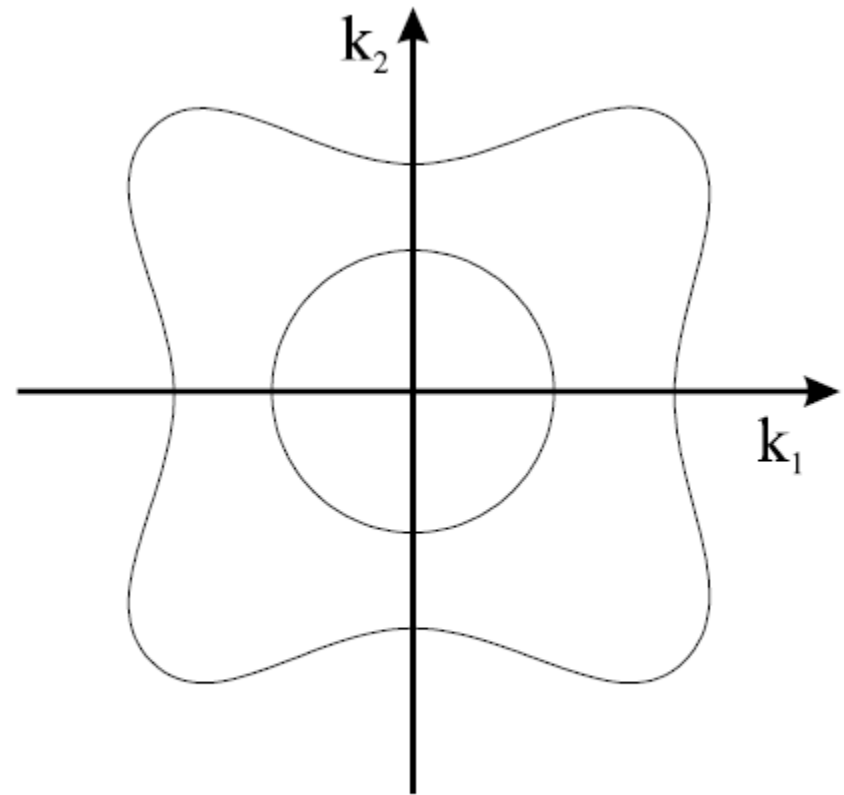
Podstawy modelu jednoelektronowego

Masa efektywna. Przybliżenie kp

Energia $E_n(\mathbf{k})$ wokół ekstremum



Przykładowa zależność energii stanów pasma n od wektora falowego \mathbf{k} .

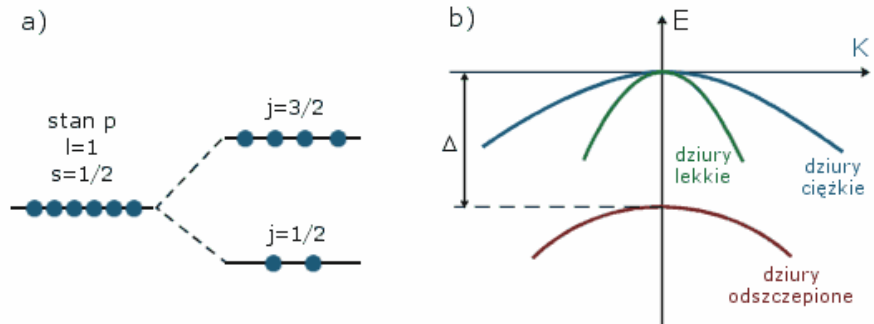
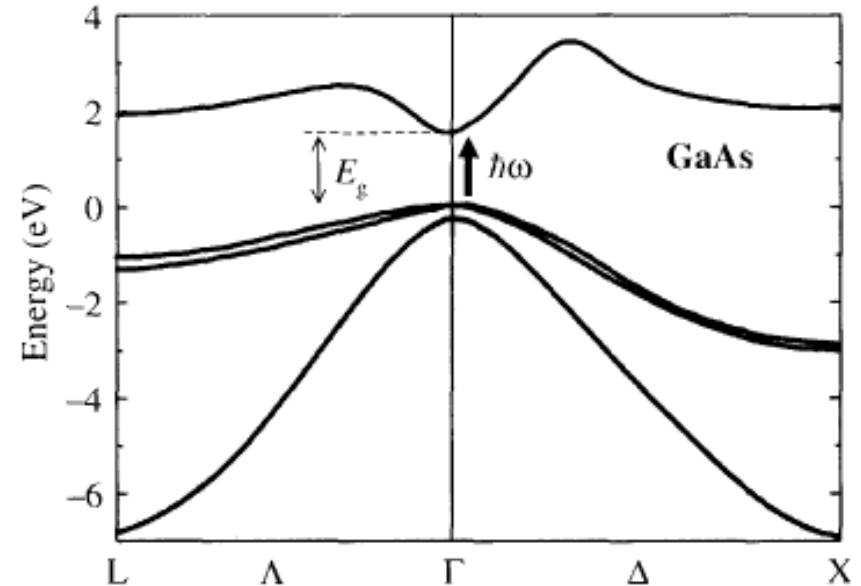
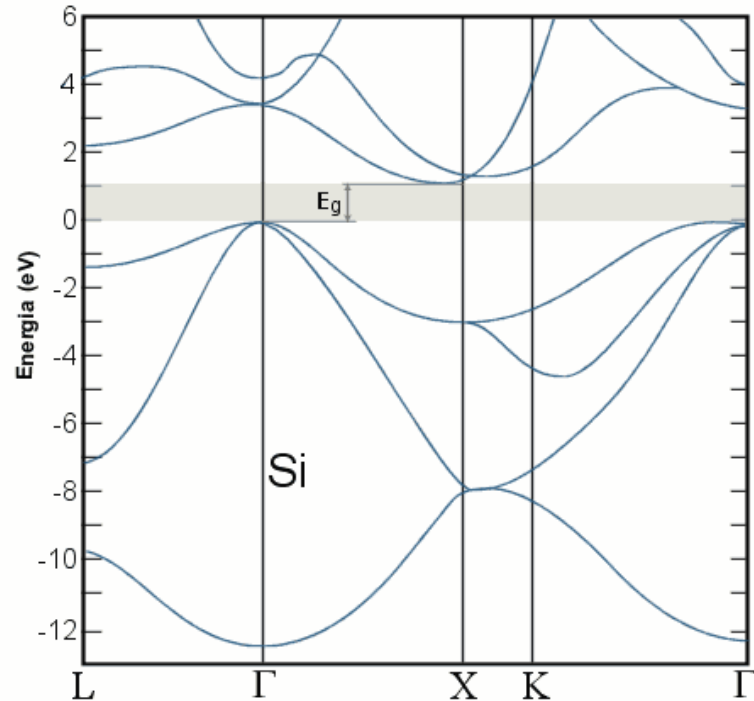


Przykładowe powierzchnie stałej energii w dwuwymiarowej przestrzeni \mathbf{k} .

Podstawy modelu jednoelektronowego

Struktura pasmowa ciał stałych

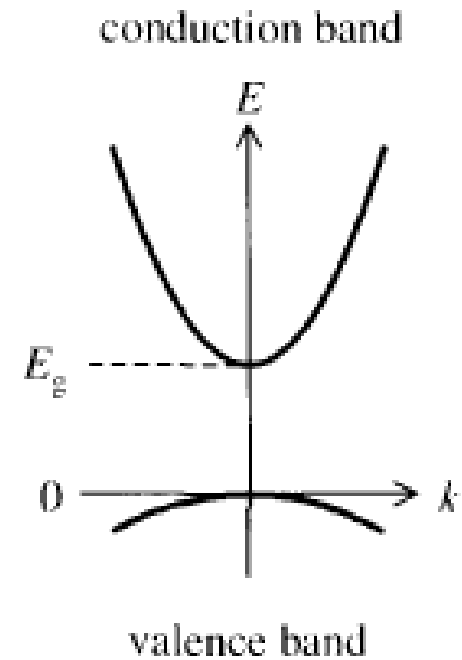
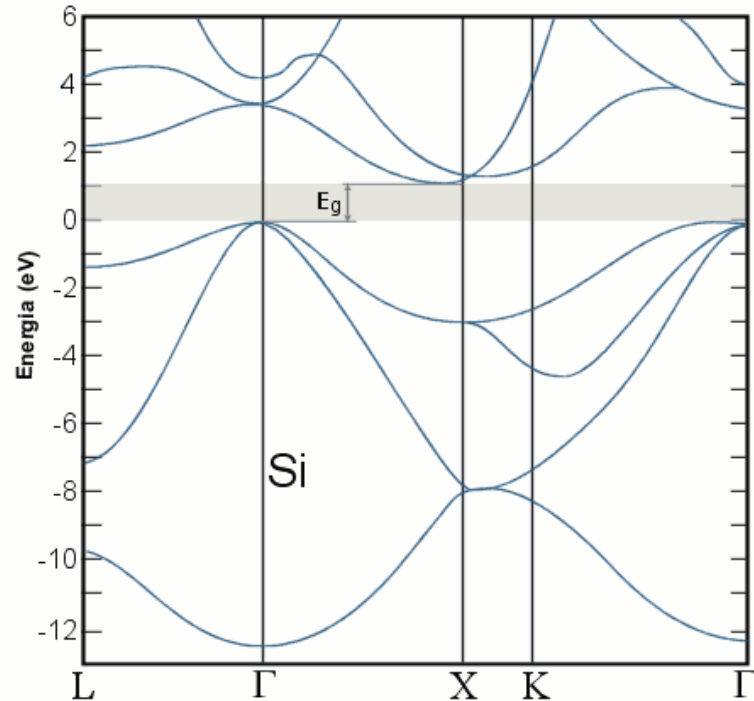
Przykłady:



Podstawy modelu jednoelektronowego

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:

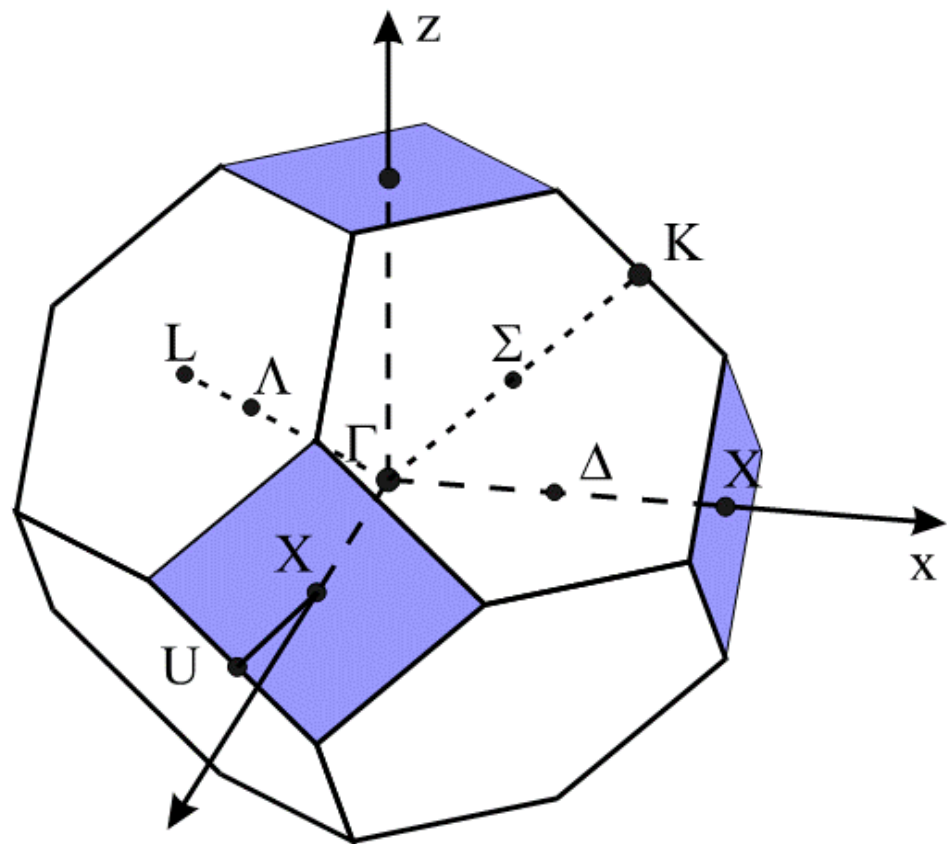
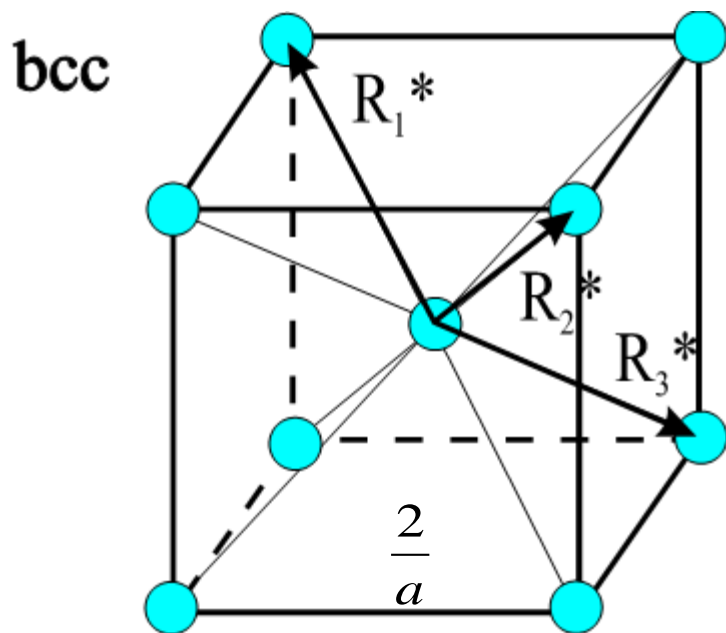


Crystal	E_g (eV) (0 K)	E_g (eV) (300 K)	Δ (eV)	m_c^*	m_{lh}^*	m_{lh}^*	m_{sh}^*
GaAs	1.519	1.424	0.34	0.067	0.5	0.08	0.15
GaSb	0.81	0.75	0.76	0.041	0.28	0.05	0.14
InP	1.42	1.34	0.11	0.077	0.6	0.12	0.12
InAs	0.42	0.35	0.38	0.022	0.4	0.026	0.14
InSb	0.24	0.18	0.85	0.014	0.4	0.016	0.47

Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Sieć odwrotna do fcc to bcc

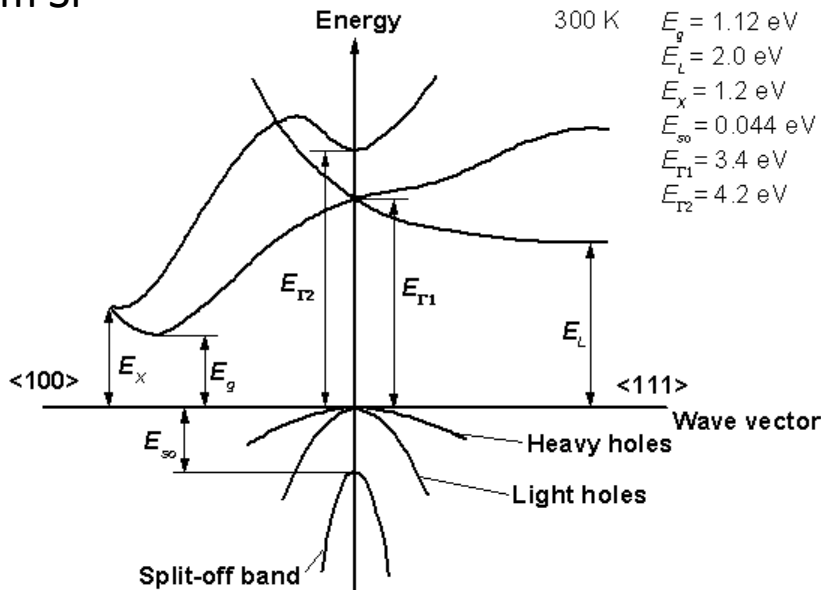
Komórka Vignera-Seitza



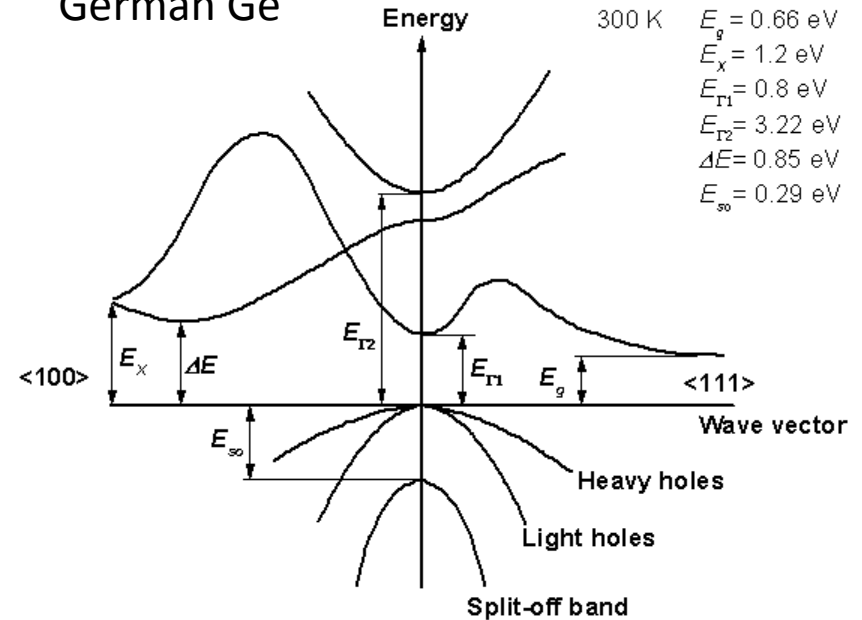
Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si



German Ge

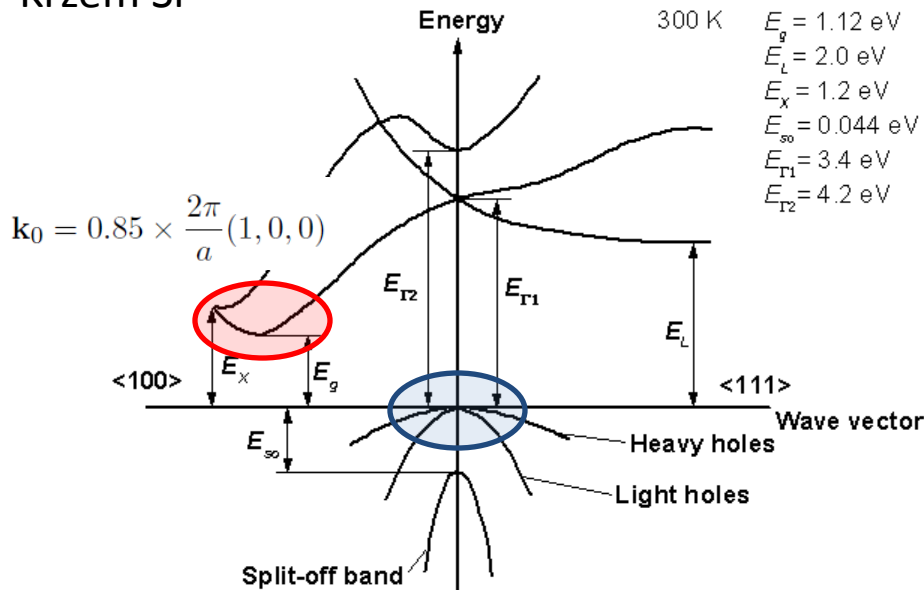


$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

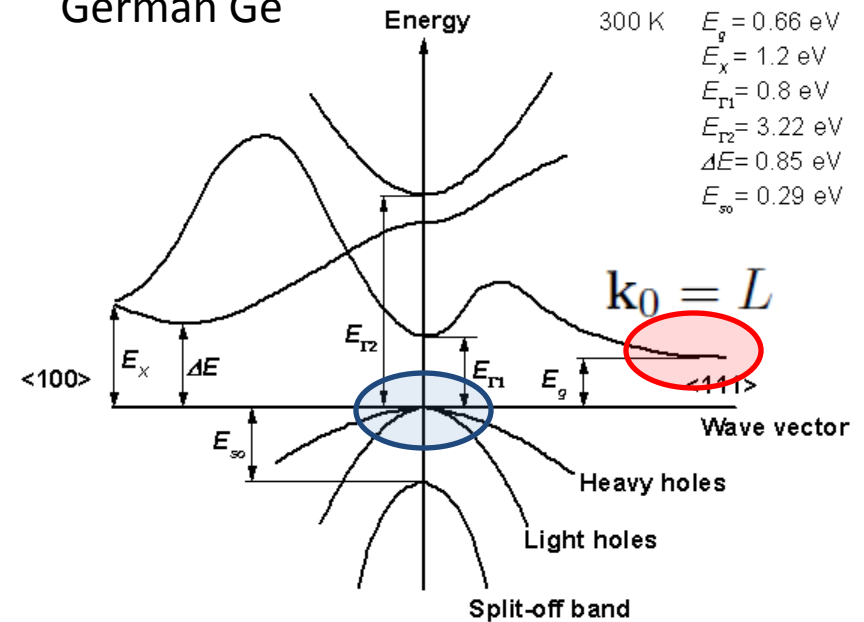
Pusta sieć – fcc. I strefa Brillouine'a

Krzem i german – przerwa skośna

Krzem Si



German Ge

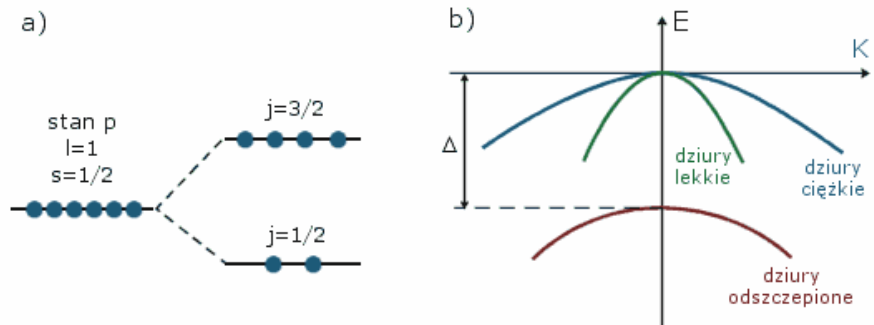
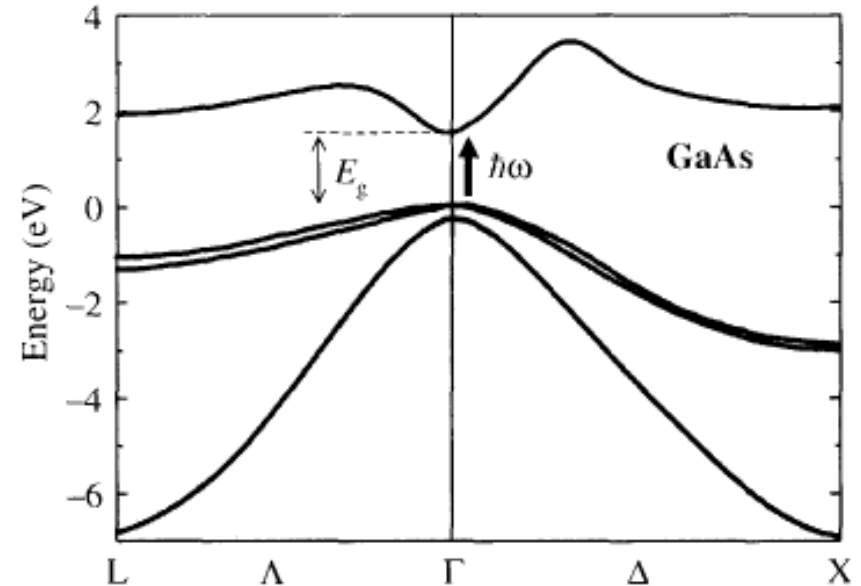
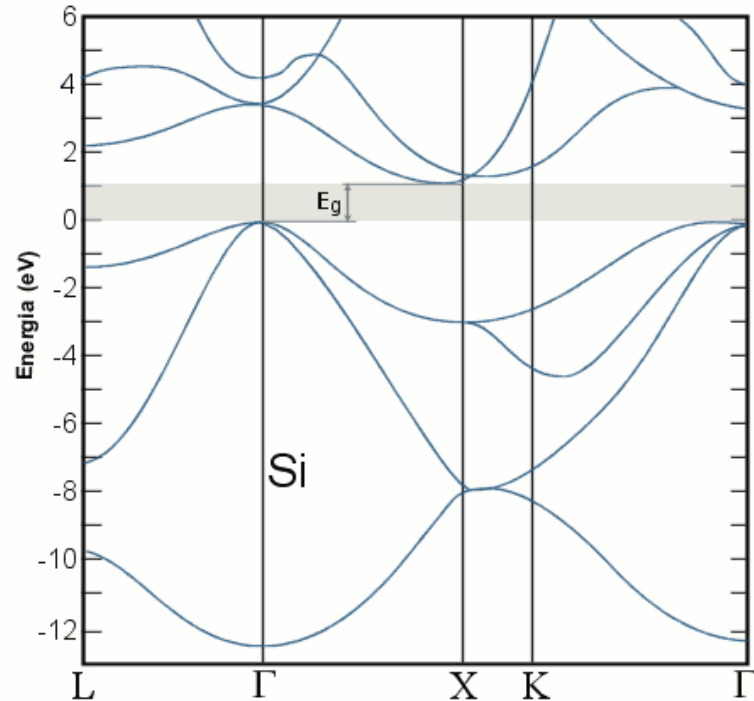


$$E(\mathbf{k}) = E_c^{min} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2] + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_z - k_{0z})^2$$

Podstawy modelu jednoelektronowego

Struktura pasmowa ciał stałych

Przykłady:



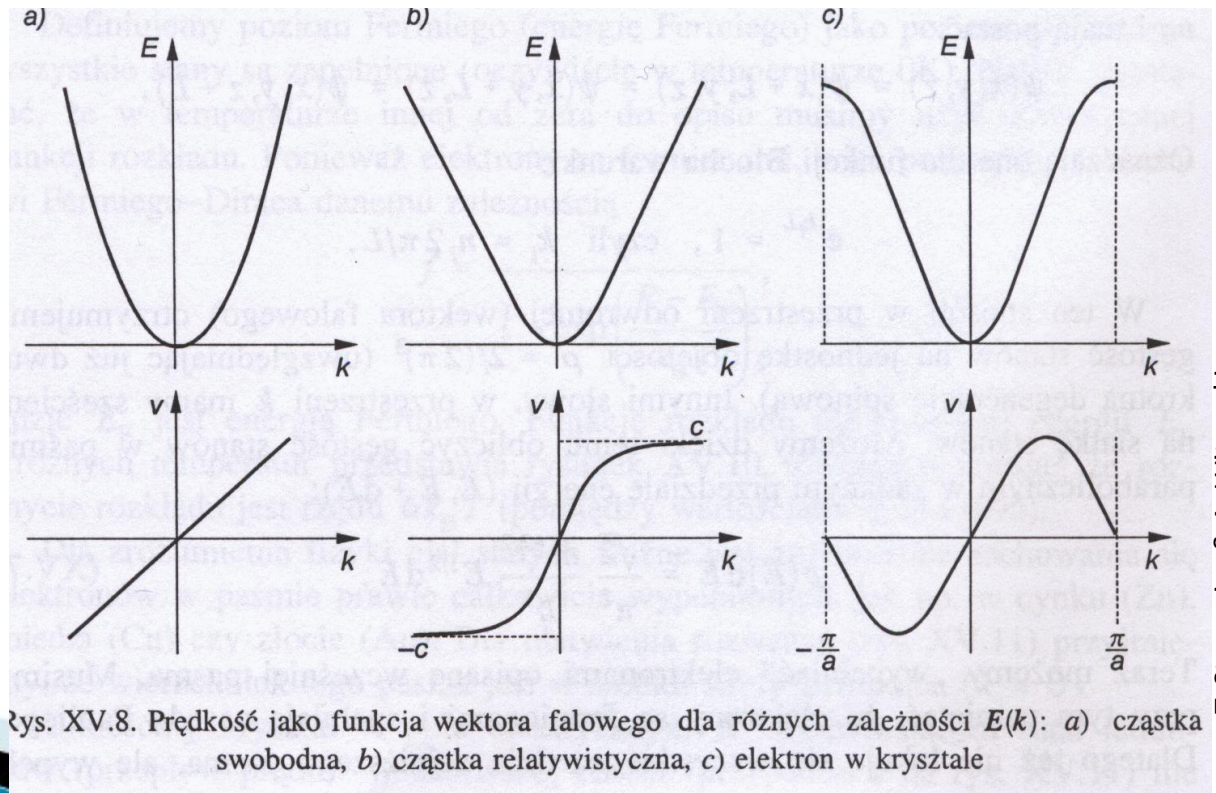
Elektrony i dziury

Twierdzenie Blocha

Zależność $E(k)$ dla elektronu w ciele stałym różni się od zależności dla elektronu swobodnego (próżni), ponieważ elektron w kryształcie stale oddziałuje z pozostałymi cząstkami układu – elektronami i jądrami.

$$E(p) = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} \quad E(p) = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} \quad E(p)$$

Elektron w ciele stałym jest quasi-cząstką. **Dlaczego?**



rys. XV.8. Prędkość jako funkcja wektora falowego dla różnych zależności $E(k)$: a) cząstka swobodna, b) cząstka relatywistyczna, c) elektron w kryształcie

Elektrony i dziury

Co to jest k ?

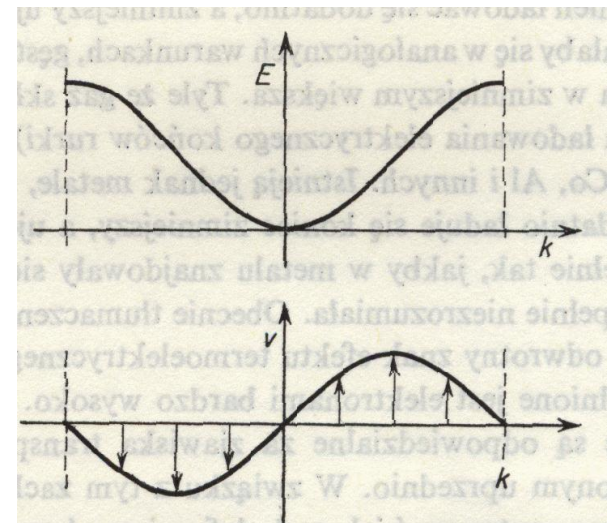
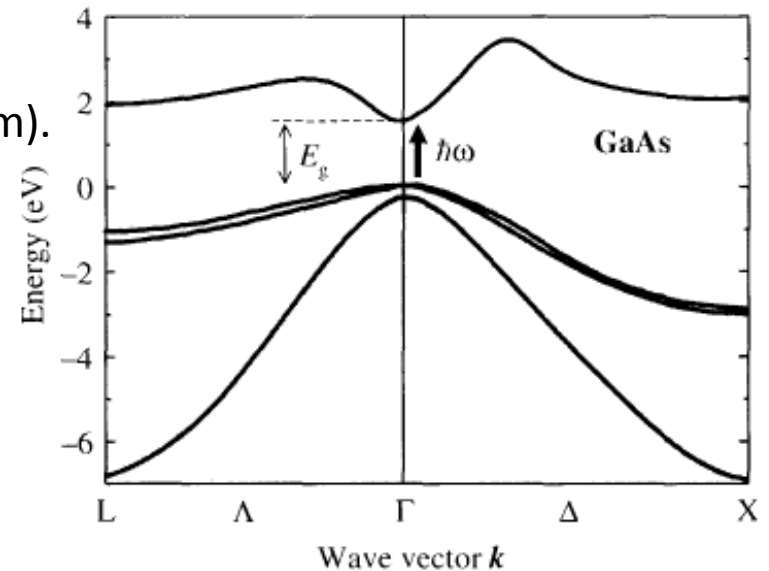
Wektor k nie jest pędem (mówimy, że jest quasi-pędem).

$$\hat{p}\psi(\vec{r}) = -i\hbar(i\vec{k} + \nabla u_{n,\vec{k}})e^{i\vec{k}\vec{r}} \neq \hbar k \psi(\vec{r})$$

Wielkość $\hbar k$ ma wymiar pędu, ale nie jest pędem ponieważ funkcja Blocha nie jest funkcją własną operatora pędu.

k jest liczbą kwantowa opisującą stany Blocha.

$$\text{Prędkość grupowa } \vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}}$$
$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$



Elektrony i dziury

Co to jest k ?

W okolicach ekstremum

$$E_n \approx E_n(0) + \left(\frac{d^2 E_n}{\hbar^2 dk^2} \right)_0 k^2 \approx E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

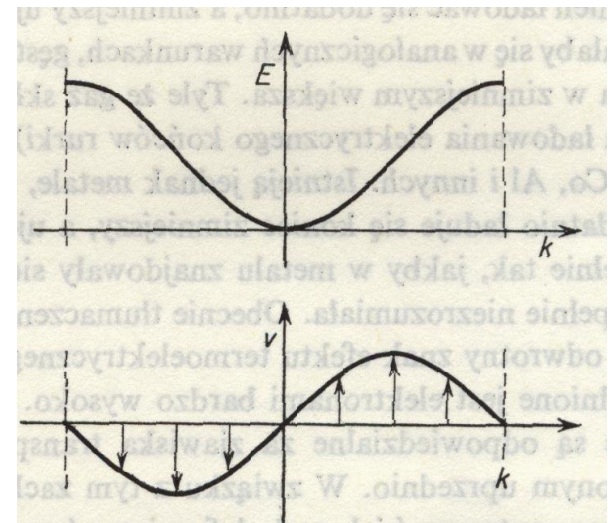
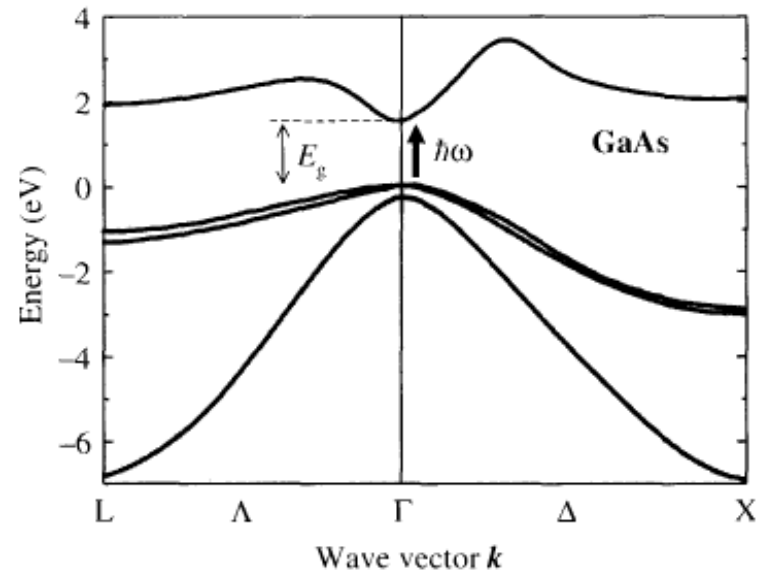
$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{m^*} \hbar \vec{k}$$

$$\hbar \vec{k} = m^* \vec{V}$$

Prędkość grupowa $\vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}}$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$



Elektrony i dziury

Siła zewnętrzna

Elektron w ciele stałym zachowuje się inaczej niż w próżni, ponieważ oddziałuje z siecią krystaliczną.

$$\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$$

$$\Delta E = FV\Delta t$$

$$\Delta E = \frac{dE}{dk} \Delta k$$

$$\Delta E = \hbar V \Delta k = FV\Delta t$$

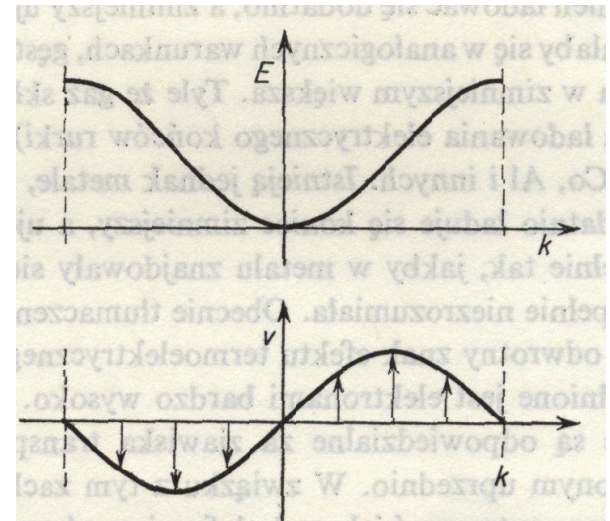
$$\hbar \Delta k = F\Delta t$$

Masa efektywna zachowuje się jak „zwykła” masa

$$\Rightarrow a = \frac{dV}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F = \frac{1}{m^*} F$$

Prędkość grupowa $\vec{V}_{gr} = \frac{d\omega}{d\vec{k}}$

$$\vec{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$$



Elektrony i dziury

Gęstość stanów

Jeśli nasz kryształ ma skończone rozmiary zbiór wektorów \mathbf{k} jest skończony (choć olbrzymi!), np. możemy przyjąć periodyczne warunki brzegowe i wtedy:

Warunki Borna-Karmana

Skończone rozmiary kryształu L_x, L_y, L_z

Ψ – postać funkcji Blocha

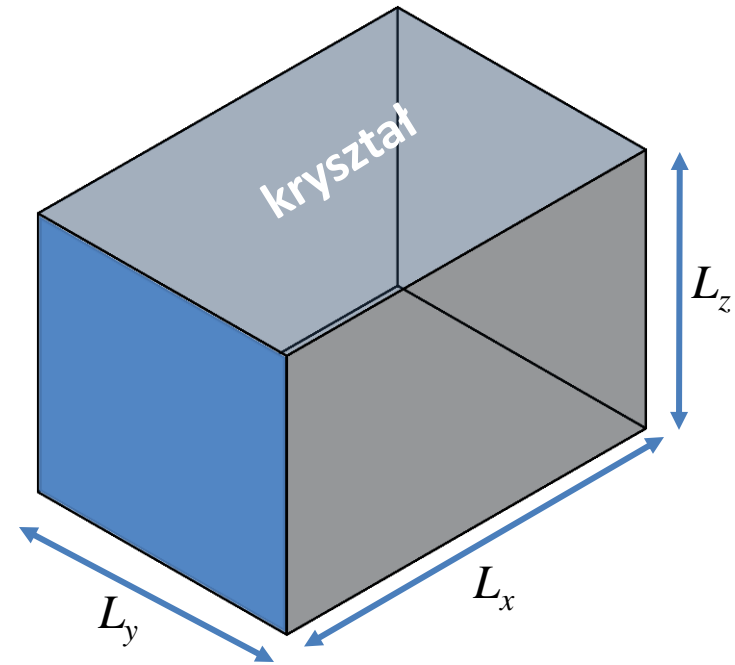
$$\Psi(x + L_x, y, z) = \Psi(x, y + L_y, z) = \Psi(x, y, z + L_z)$$

$$e^{ik_x L_x} = 1$$

$$e^{ik_y L_y} = 1$$

$$e^{ik_z L_z} = 1$$

$$\vec{k}_i = 0, \pm \frac{2\pi}{L_i}, \pm \frac{4\pi}{L_i}, \dots, \pm \frac{2\pi n_i}{L_i}$$



Stany te wyznaczają w przestrzeni odwrotnej siatkę o gęstości $(V/2\pi)^3$
Gęstość stanów na jednostkę trójwymiarowej przestrzeni k

$$\rho_k = 2 \left(\frac{1}{2\pi} \right)^3$$

Elektrony i dziury

Zjawisko termoelektryczne Seebecka (1821)

Na, K, Co, Al – elektrony

Zn, Cu, Au - ???

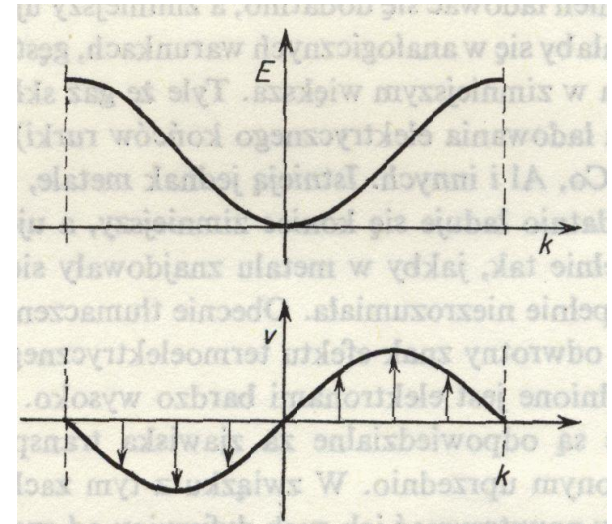
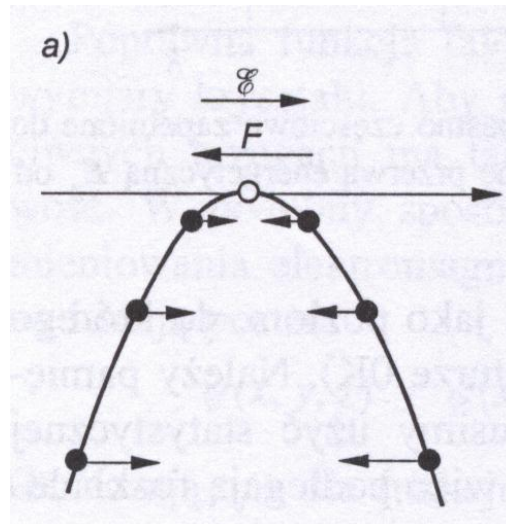
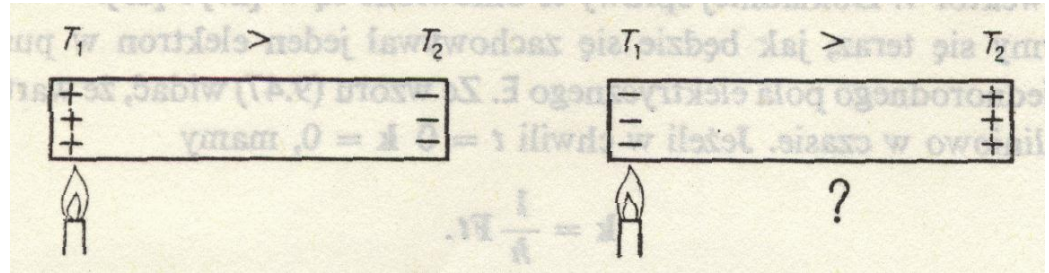
Pasma prawie całkowicie wypełnione elektrony.

Masa efektywna ujemna.

Jeden stan pusty.

Całkowity pęd

$$\vec{j} = -\sum_i e\vec{v}_i = 0$$



Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Sumaryczny pseudopęd wypełnionego pasma:

$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

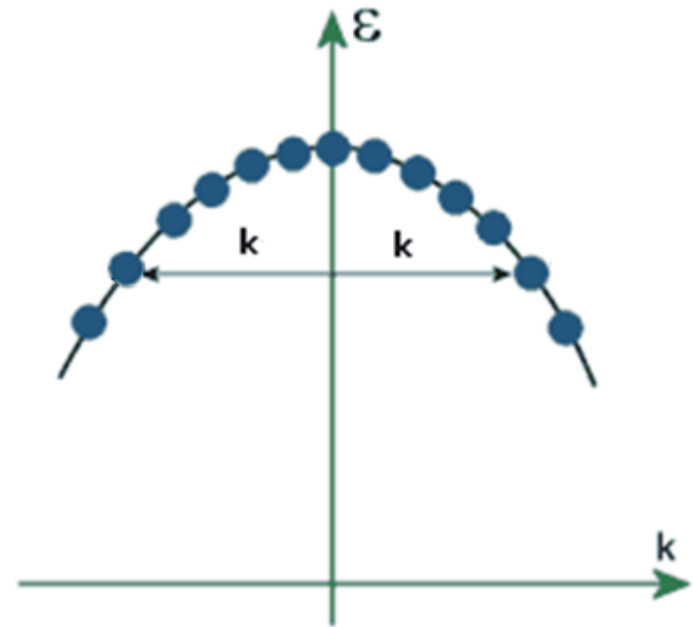
Dla funkcji okresowej $f(\mathbf{r})$:

$$I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3\mathbf{r} f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \text{const}$$

← komórka elementarna

$$0 = \nabla' I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla' f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$

$$0 = \nabla'^2 I(\mathbf{r}') := \int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla'^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}') = \int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r} + \mathbf{r}')$$



Dla $f(\mathbf{r} = 0)$:

$$\int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_{\Omega} d_3\mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Sumaryczny pseudopęd wypełnionego pasma:

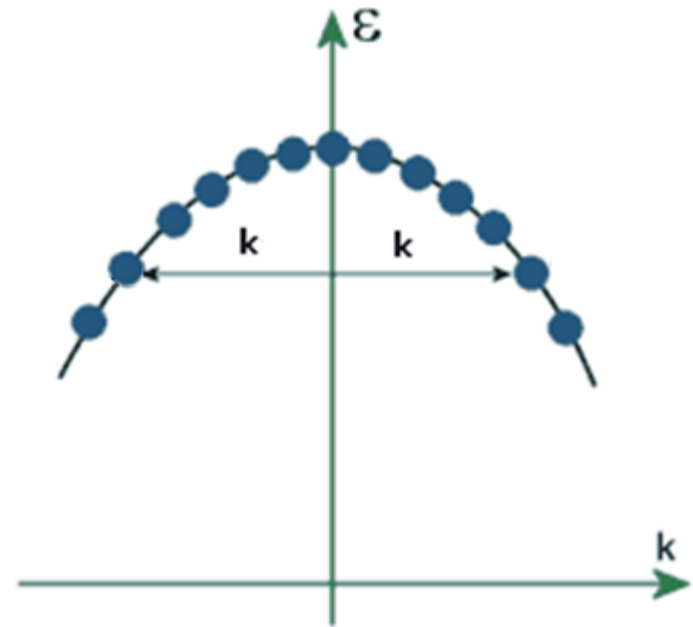
$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Zatem:

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{4\pi^3 \hbar} \int_{SB} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) d_3 \mathbf{k} = 0$$

Całkowity prąd:

$$\langle \mathbf{j} \rangle = -e \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{v}_i = -e \langle \mathbf{v} \rangle = 0$$



Dla $f(\mathbf{r} = 0)$:

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla f(\mathbf{r}) = 0$$

$$\int_{\Omega} d_3 \mathbf{r} \nabla^2 f(\mathbf{r}) = 0$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

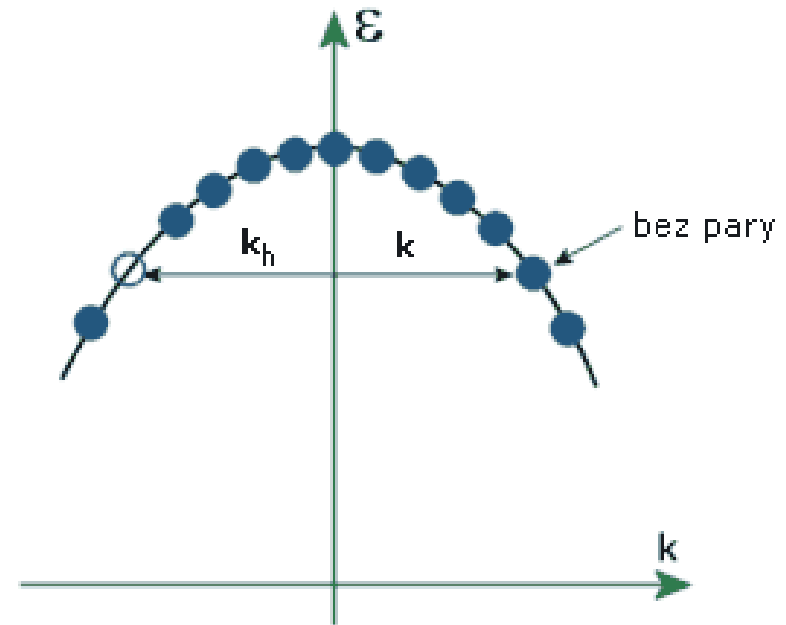
Sumaryczny pseudopęd wypełnionego pasma:

$$\langle \hbar \mathbf{k} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \hbar \mathbf{k}' = 0$$

Pseudopęd dziury:

$$\hbar \vec{k}_h = \sum_i \hbar \mathbf{k}_i$$

$$\hbar \vec{k}_h = \hbar \vec{k}_e$$



Masa efektywna elektronu w paśmie walencyjny jest ujemna.

$$\vec{v}_h = \vec{v}_{e-w-pustym-miejscu} = -\vec{v}_{e-bez-pary} = -\frac{\hbar \vec{k}_{e-bez-pary}}{m^*} = \left(-\frac{1}{m^*} \right) \hbar \vec{k} = \frac{1}{m_h^*} \hbar \vec{k}_h$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Dla opisanie sumarycznych właściwości tych $2N-1$ elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki - dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje właściwości zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.

Jeśli $f(\mathbf{k})$ pewna wielkość fizyczna charakteryzująca elektron o wektorze falowym \mathbf{k} to wartość tej wielkości dla dziury:

$$f_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} f(\mathbf{k}_i) \quad \text{dla pasma w którym brakuje elektronu w stanie } j$$

Np. wektor falowy dziury:

$$\mathbf{k}_d = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{2N} \mathbf{k}_i = \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e = -\mathbf{k}_e$$

Np. prędkość dziury:

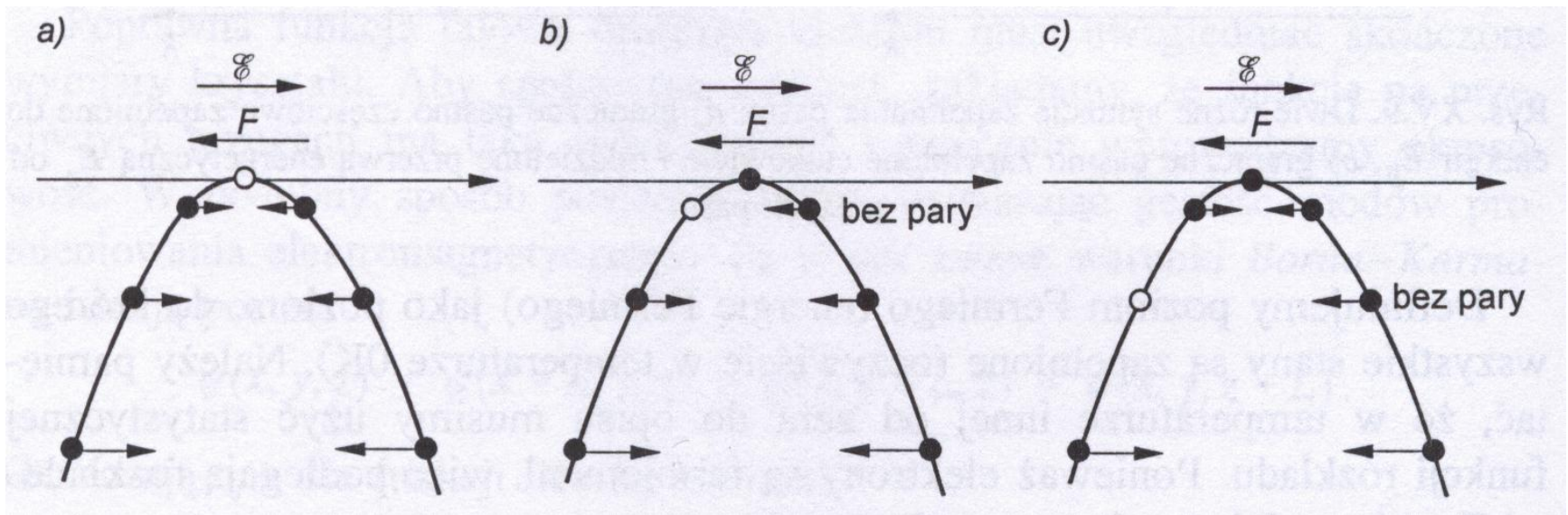
$$\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_e) = -\mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

$$\mathbf{v}_d(\mathbf{k}_d) = \mathbf{v}_e(\mathbf{k}_e)$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Dla opisu sumarycznych właściwości tych $2N-1$ elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki - dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje właściwości zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.



Np. prędkość dziury:

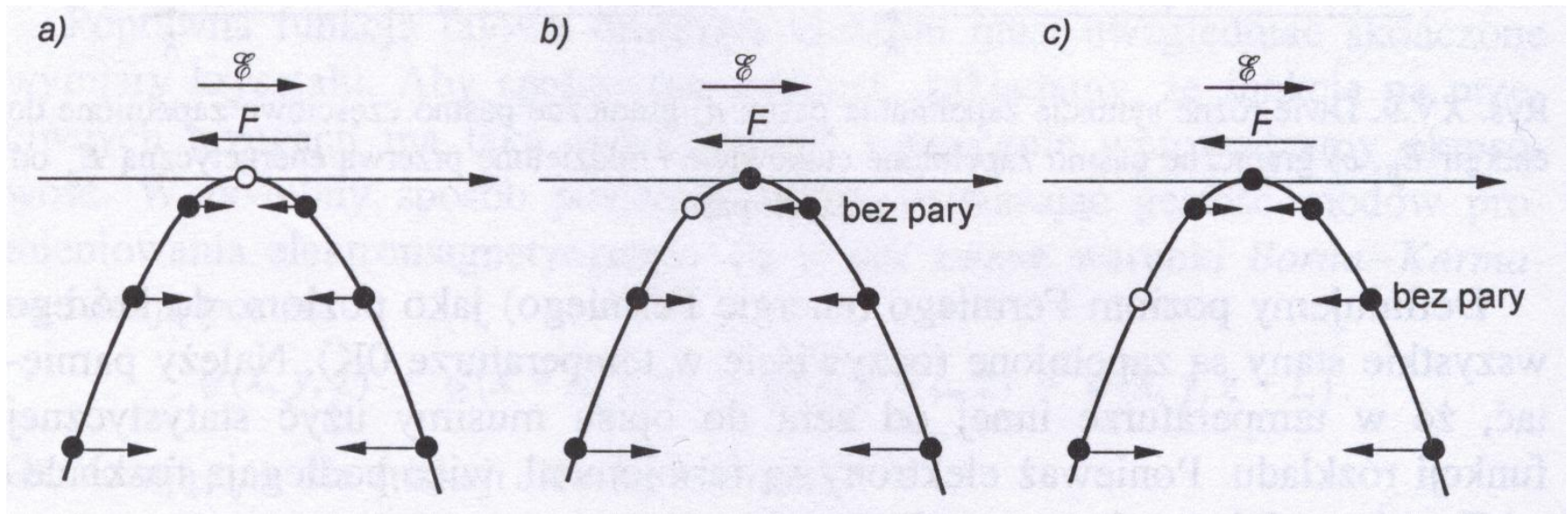
$$v_d(\mathbf{k}_e) = -v_e(\mathbf{k}_e)$$

$$v_d(\mathbf{k}_d) = v_e(\mathbf{k}_e)$$

Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Dla opisu sumarycznych właściwości tych $2N-1$ elektronów wprowadzamy pojęcie nowej kwazicząstki - dziury. Dziura quasi cząstka z dodatnią masą efektywną, która opisuje właściwości zbioru elektronów w ciele stałym o masie ujemnej z jednym stanem pustym.



Pole elektryczne E

$$\vec{j} = -e\vec{v}_{e\text{-bez-pary}}$$

$$\vec{j} = +e\vec{v}_{e\text{-w-pustym-miejscu}}$$

$$\vec{v}_h = \vec{v}_{e\text{-w-pustym-miejscu}}$$

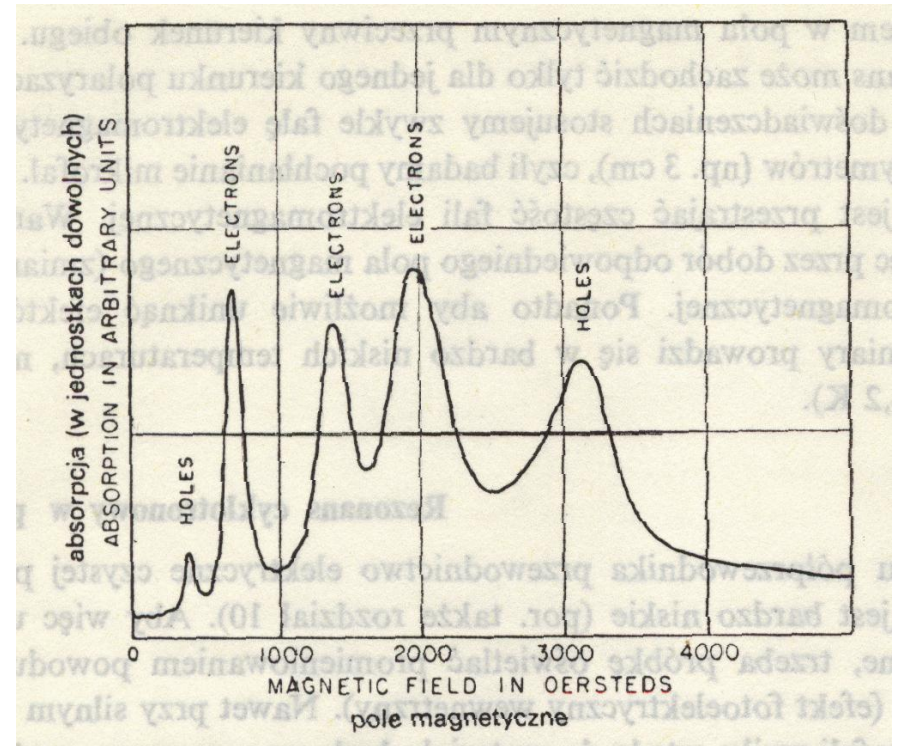
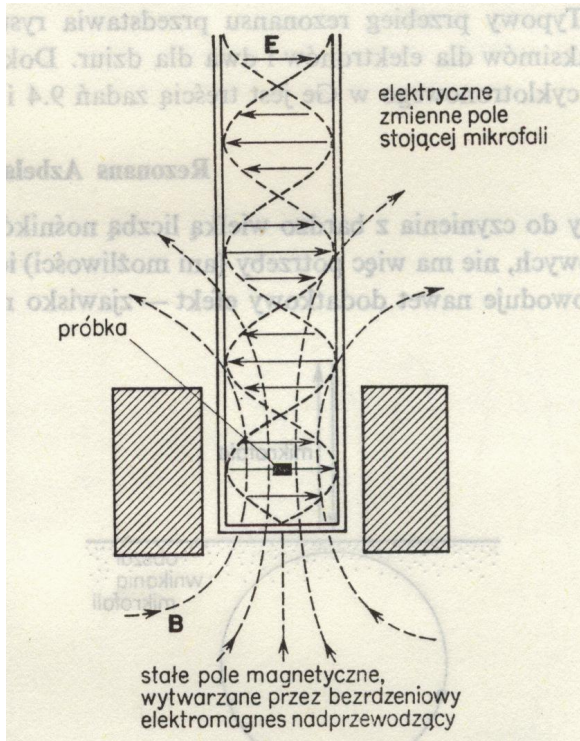
Elektrony i dziury

Kwazicząstki - dziury

Wyznaczanie masy efektywnej:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}$$

Rezonans cyklotronowy

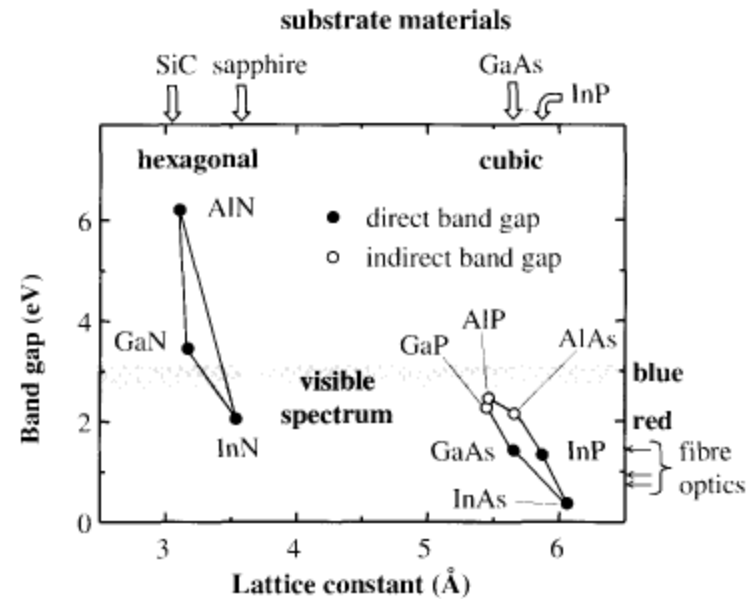
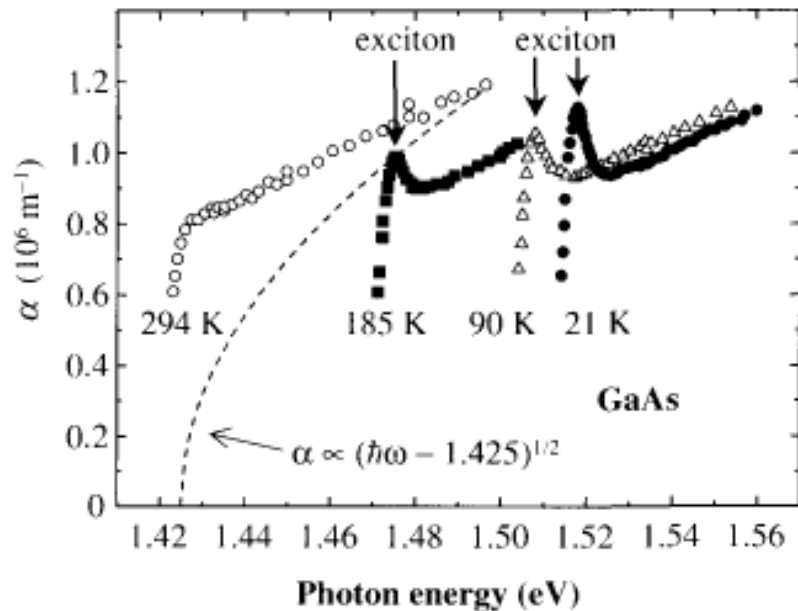


Ge, J. Ginter

Elektrony i dziury

Przerwa energetyczna

Wyznaczanie przerwy energetycznej:



Przerwa energetyczna

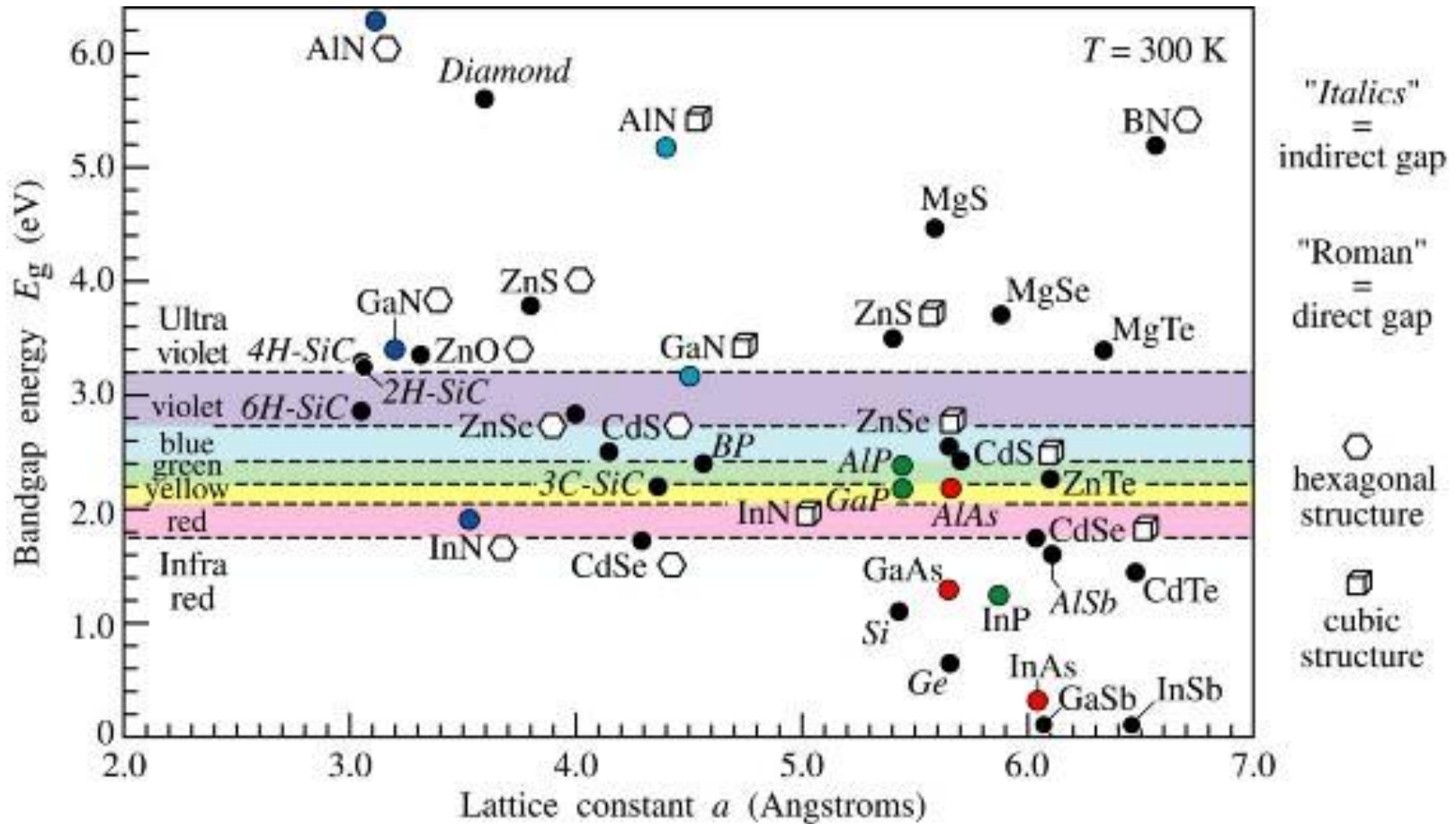


Fig. 11.4. Room-temperature bandgap energy versus lattice constant of common elemental and binary compound semiconductors.

Elektrony i dziury

Własności pasm

Prawdopodobieństwo obsadzenia stanu kwantowego o energii E

E_F – potencjał chemiczny

Fermiony:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

Elektrony

Dziury

Triony (eksycytony naładowane)

Bozony:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} - 1}$$

Polaritony

Fonony

Magnony

Eksycytony, bieksycytony

Plazmony

Rozkład Boltzmana:

$$f_0 = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} \pm 1} \approx e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}}$$

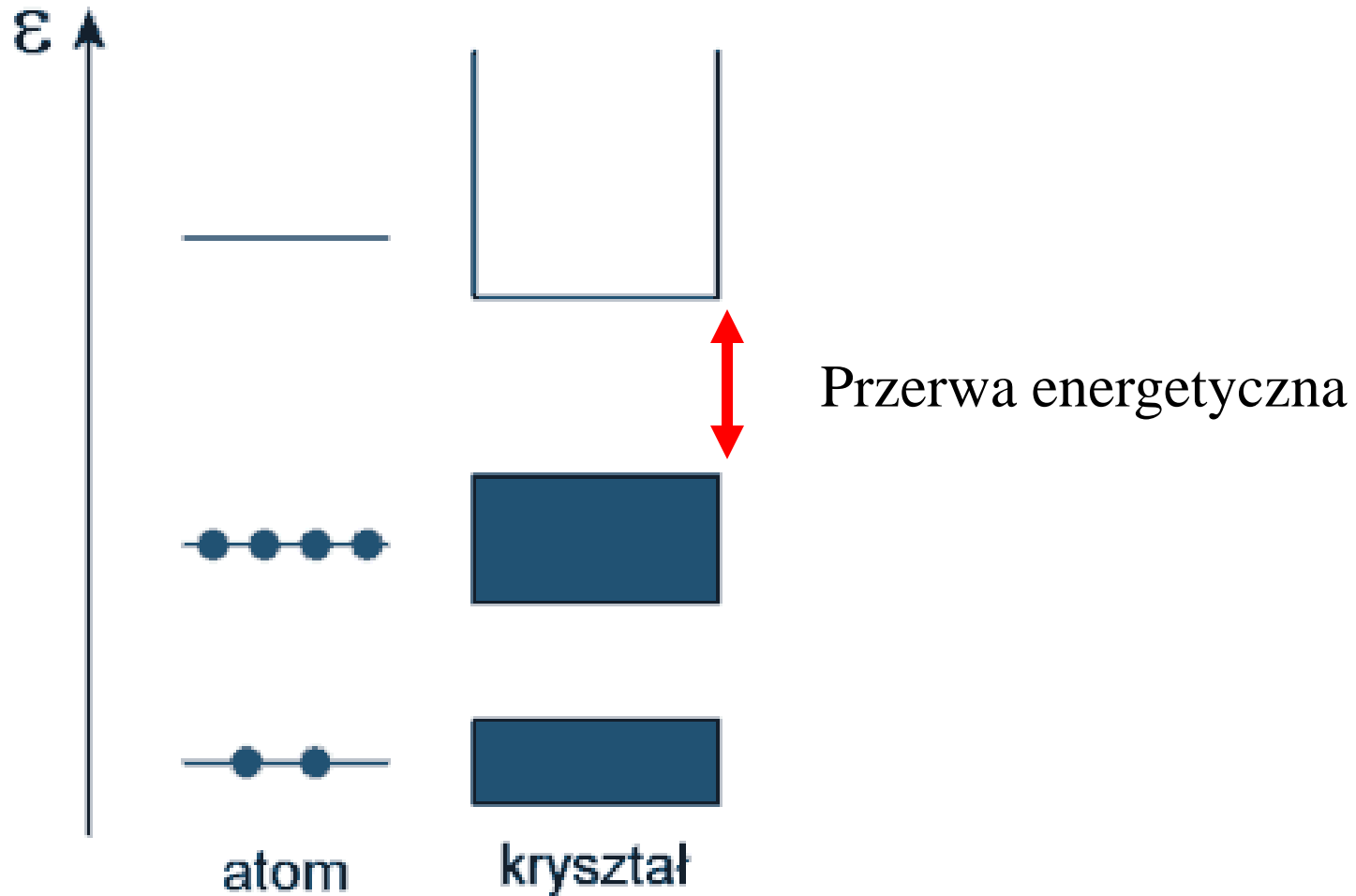
$$E_F = \frac{\partial F}{\partial n_i}$$

$$F = U - TS$$

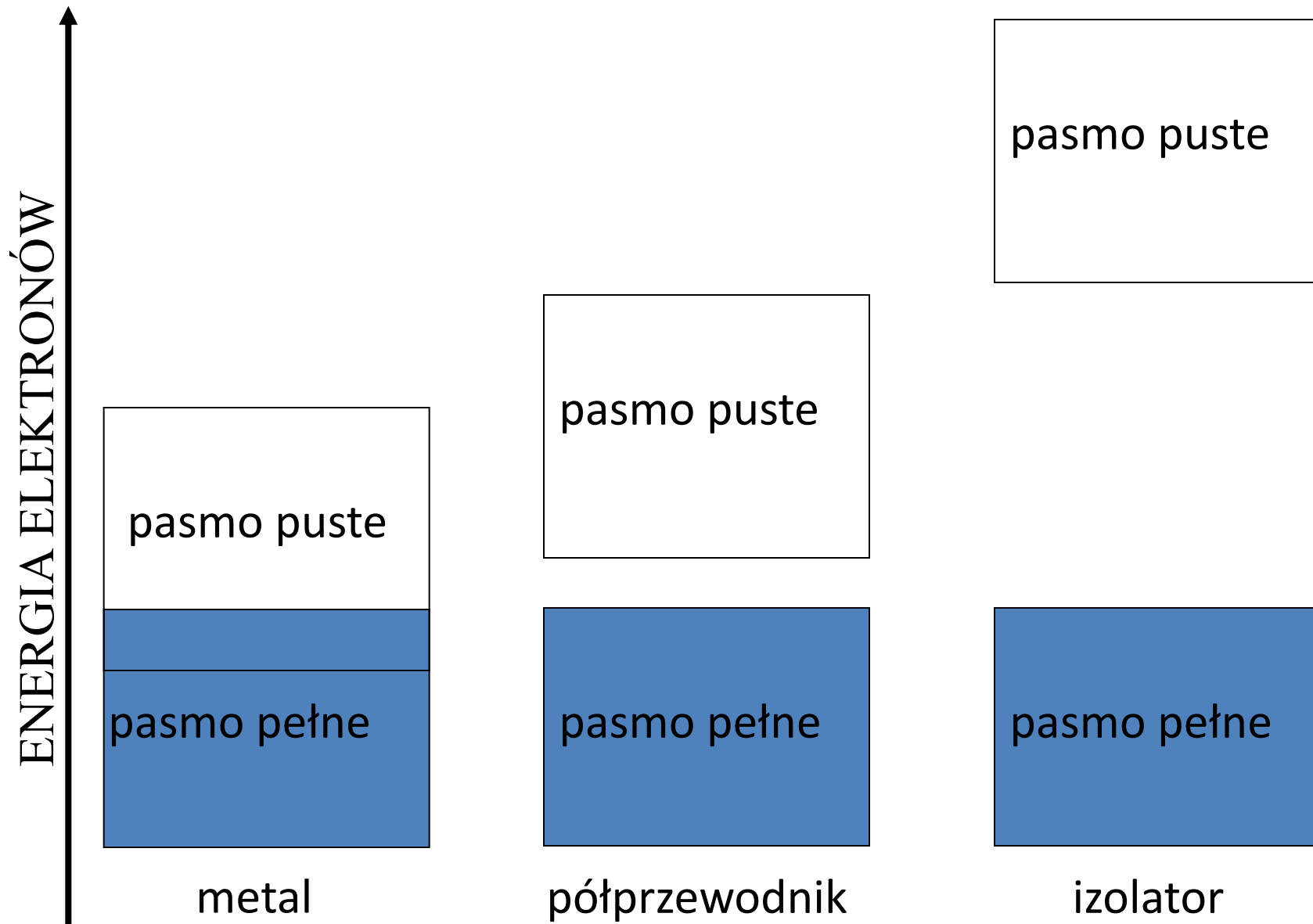
Anyons – np. composite fermions $|\psi_1\psi_2\rangle = e^{i\theta}|\psi_2\psi_1\rangle$

Slave fermions (chargon, holon, spinon) = fermion+bozon w separacji spin-ładunek

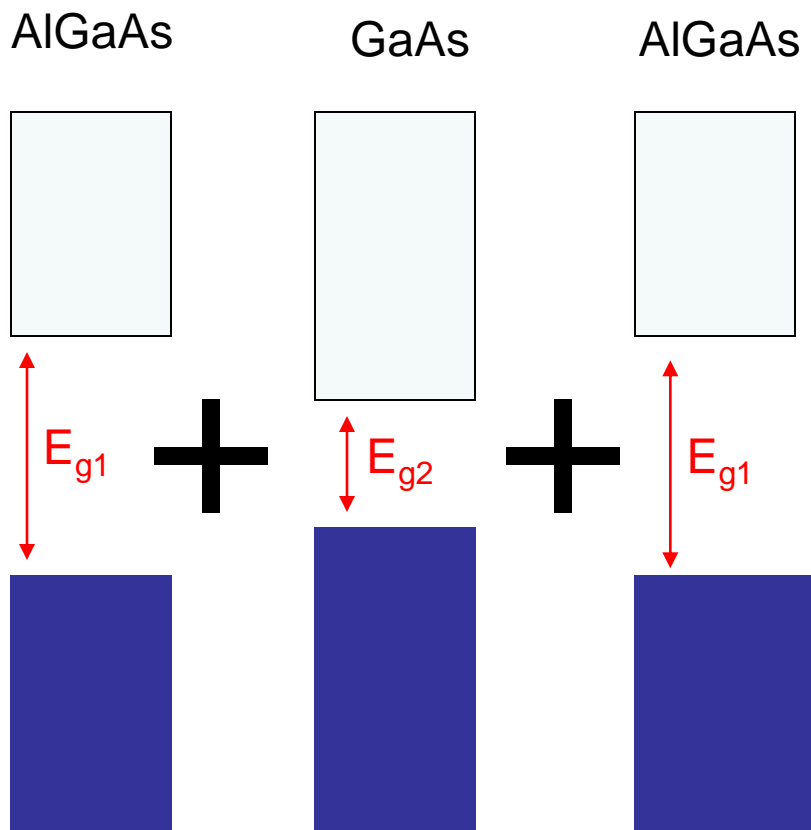
Teoria pasmowa ciał stałych.



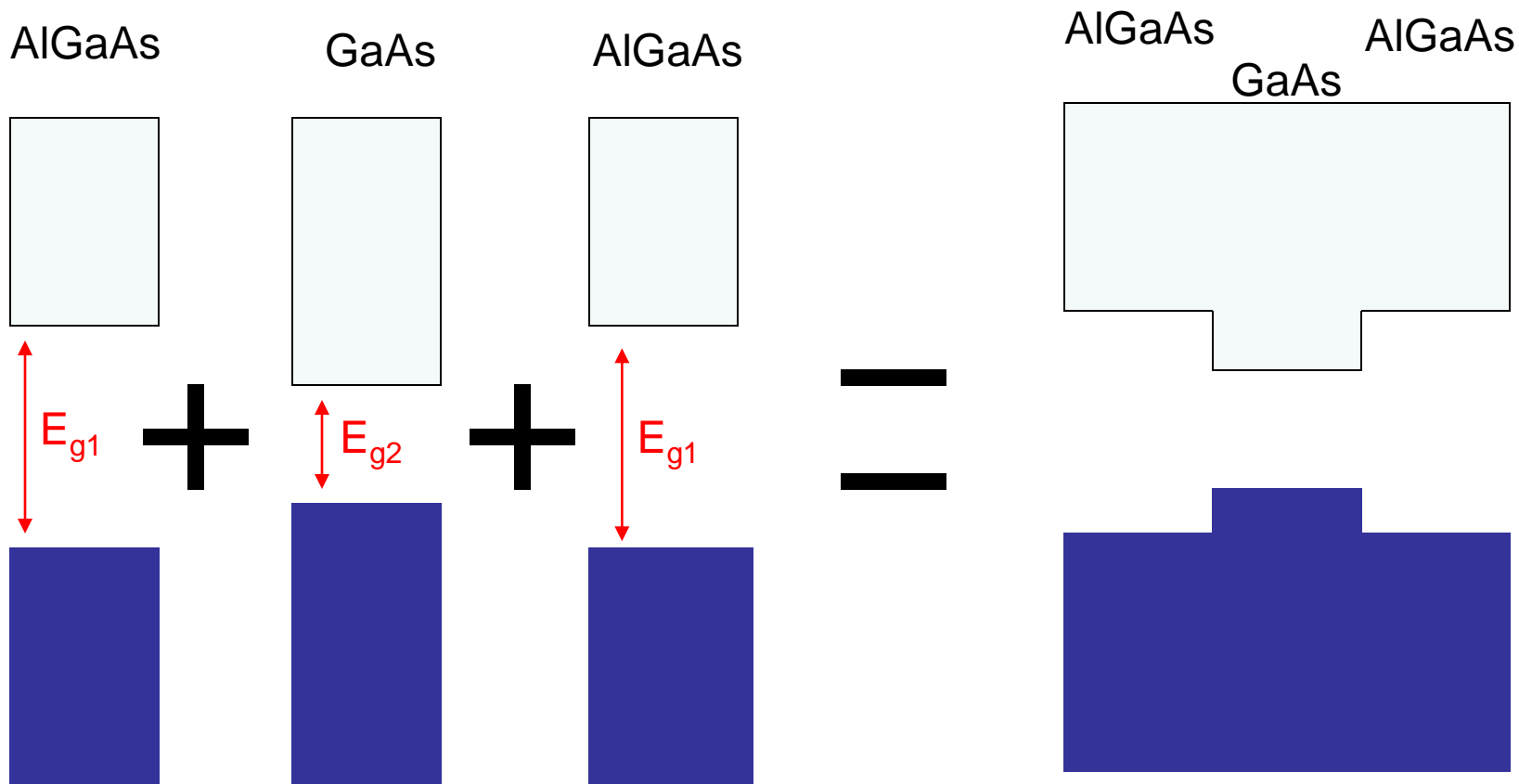
Teoria pasmowa ciał stałych.



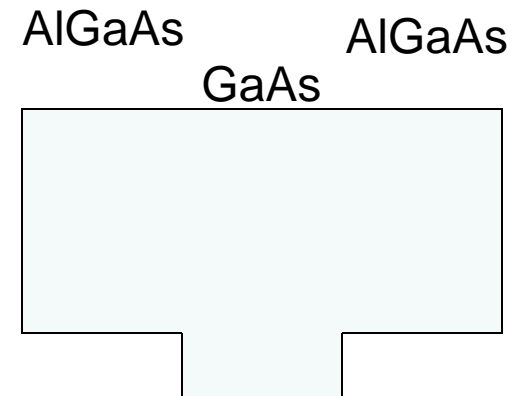
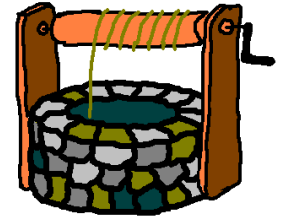
Studnia Kwantowa



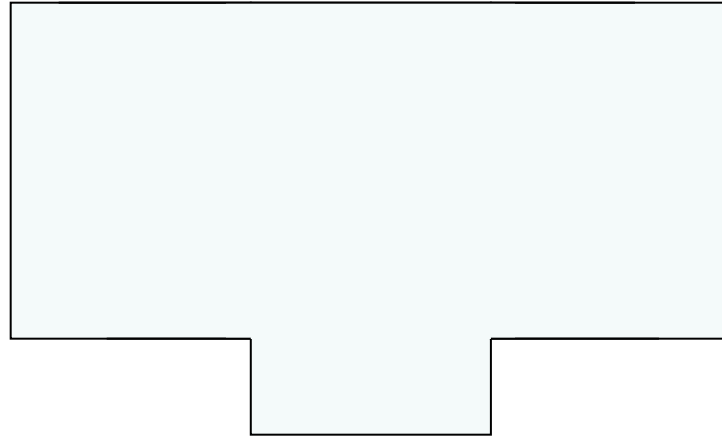
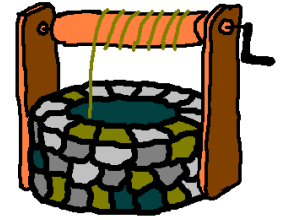
Studnia Kwantowa



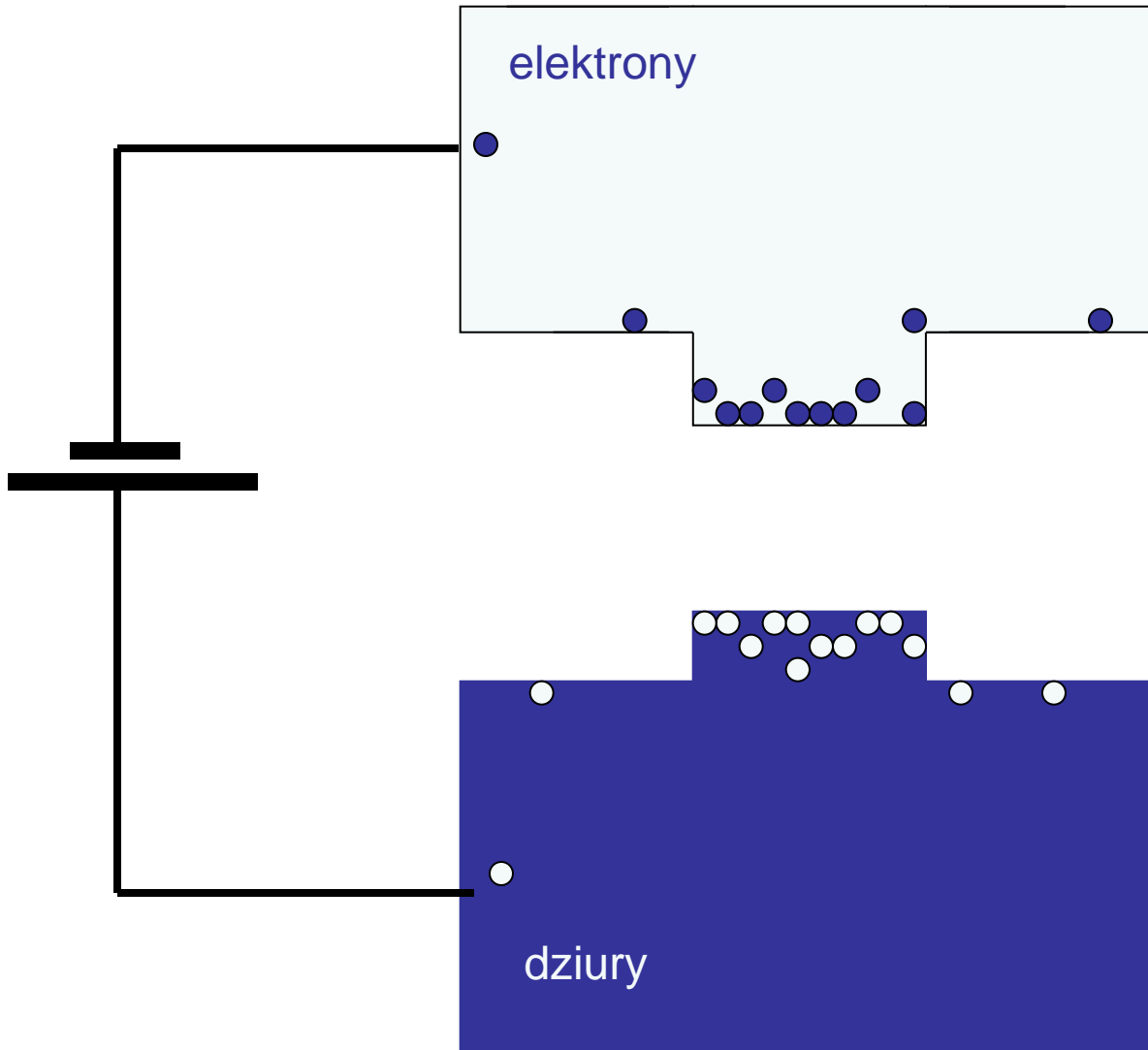
Studnia Kwantowa



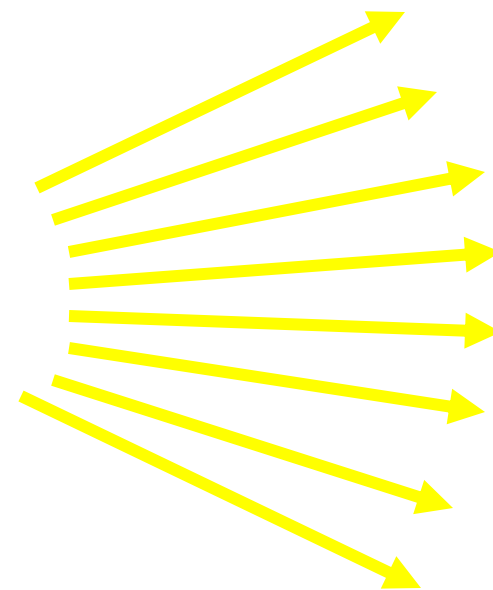
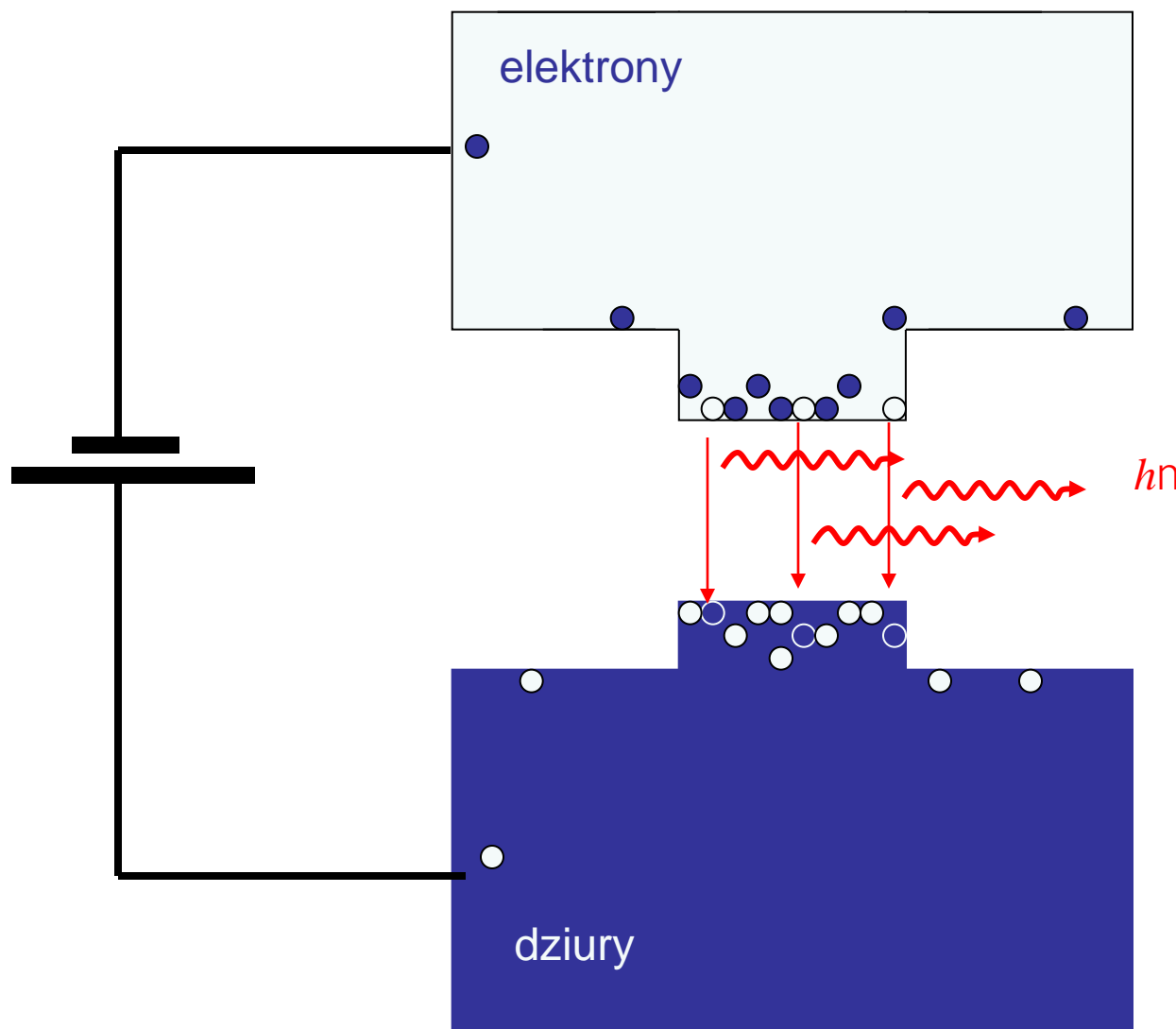
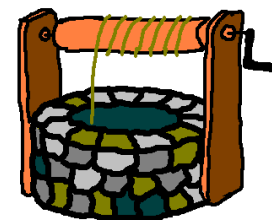
Studnia Kwantowa



Studnia Kwantowa



Studnia Kwantowa



Studnie Kwantowe

Lasery półprzewodnikowe

